

***Propositions de méthodes et modèles eulériens pour
les problèmes à interfaces entre fluides compressibles
en présence de transfert de chaleur***

Jacques Massoni — Richard Saurel — Boniface Nkonga — Rémi Abgrall

N° 4178

April 2001

THÈME 4



***rapport
de recherche***

Propositions de méthodes et modèles eulériens pour les problèmes à interfaces entre fluides compressibles en présence de transfert de chaleur

Jacques Massoni^{*}, Richard Saurel[†], Boniface Nkonga[‡], Rémi Abgrall[§]

Thème 4 — Simulation et optimisation
de systèmes complexes
Projet SMASH

Rapport de recherche n° 4178 — April 2001 — 37 pages

Résumé : On évalue différentes formulations euleriennes aptes au traitement de problèmes à interfaces entre fluides compressibles. La difficulté dans ce type de problème réside dans le calcul des variables thermodynamiques dans les zones de diffusion numériques produites aux interfaces. En effet, tout schéma eulérien diffuse artificiellement les discontinuités de contact (ou interfaces) et produit donc un mélange artificiel pour lequel la détermination de l'état thermodynamique est difficile. De plus, lorsque l'état thermodynamique est mal déterminé, les méthodes échouent très rapidement en raison de pressions négatives ou d'arguments négatifs dans le calcul de la vitesse du son. Les modèles et les méthodes de résolution qui sont évaluées n'ont jamais été examinées pour le calcul de la température aux interfaces. L'examen des défauts et avantages de ces formulations nous conduit à en rejeter certaines et à en proposer une nouvelle, très efficace. Ce nouveau modèle est accompagné de son schéma numérique. On présente ensuite le traitement des transferts diffusifs aux interfaces, puis un exemple de résolution en deux dimensions d'espace. L'évaluation est effectuée sur une série de problèmes possédant des solutions exactes.

Mots-clés : Interface, Ecoulements diphasiques, transfert de chaleur, Modèles Eulériens, Méthodes numériques

^{*} IUSTI, Université Aix Marseille I, 5 rue E. Fermi, 13453 Marseille Cedex 13, and Projet SMASH, INRIA Sophia Antipolis, 2004 route des Lucioles, 06902 Sophia Antipolis, jacques@iusti.univ-mrs.fr

[†] IUSTI, Université Aix Marseille I, 5 rue E. Fermi, 13453 Marseille Cedex 13, and Projet SMASH, INRIA Sophia Antipolis, 2004 route des Lucioles, 06902 Sophia Antipolis, richard@iusti.univ-mrs.fr

[‡] Département de Mathématiques Appliquées, Université de Bordeaux I, 351 cours de la Liberation, Talence Cedex, nkonga@math.u-bordeaux.fr

[§] Département de Mathématiques Appliquées, Université de Bordeaux I, 351 cours de la Liberation, Talence Cedex, abgrall@math.u-bordeaux.fr

Propositions of methods and Eulerian models for interface problems between compressible fluids in the presence of heat transfer

Abstract: We examine various formulations for the numerical resolution of interface problems with compressible fluids. The difficulty with this type of problem relies in the computation of the thermodynamic variables inside the numerical diffusion zone at the interfaces. Indeed, any eulerian numerical scheme produces artificial diffusion zones at the interfaces and produces consequently an artificial mixture for which the determination of thermodynamic variables is difficult. An inaccuracy in their determination induces failure of the computation (negative pressure or negative argument in the sound speed computation). Moreover, these models and methods have never been examined for the temperature computation. The examination of their drawbacks results in the reject of some of them and to the proposition of a very efficient new model. This model is presented with its own numerical method. We then explain the way to solve heat diffusion at the interface and give a computational example in two-dimensions. The evaluation of these models is achieved over a serie of problems with exact solution.

Key-words: Interface, two-phase flows, Eulerian models, Numerical methods

1 Introduction

Le problème type qui est visé pour la modélisation et la simulation numérique est schématisé sur la figure 1. Il consiste à étudier le comportement d'une couche de matériau dense contenant un matériau léger soumis à un fort rayonnement. L'ensemble est placé dans un autre matériau léger, un fluide ambiant.

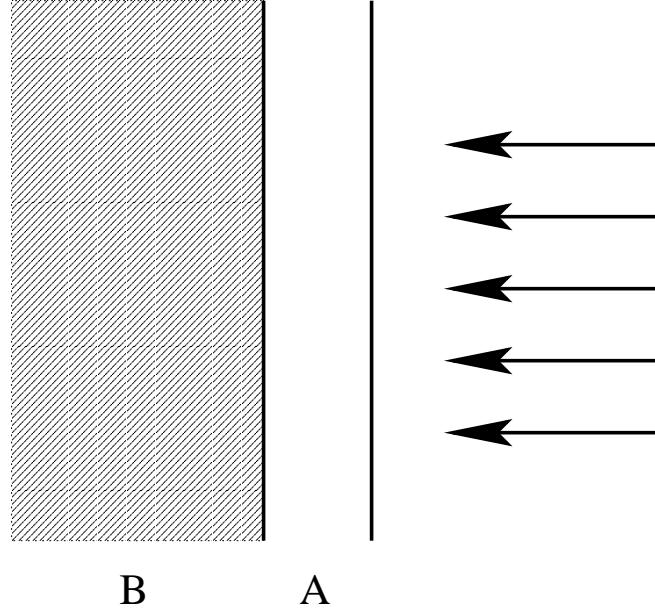


FIG. 1 – Schéma du problème

Dans ces conditions, suite à l'absorption d'énergie, une couche du matériau dense se dilate fortement et simultanément une forte onde de choc se propage dans le matériau. Il s'ensuit des propagations d'ondes multidimensionnelles qui interagissent avec les différentes interfaces. Ces interfaces présentant une certaine courbure locale, et les phénomènes étant hautement non linéaires, des instabilités hydrodynamiques du type Richtmyer Meshkov apparaissent sur les interfaces internes et externes.

Dans la suite de ce document nous considérerons uniquement le problème d'hydrodynamique associé à cette configuration. En effet, les transferts radiatifs et les différents phénomènes réactifs ne seront pas considérés.

Ainsi, en se focalisant sur le problème d'hydrodynamique et en oubliant momentanément les problèmes de discrétisation qui apparaissent aux interfaces et qui nécessiteront l'introduction de formulations adaptées, la formulation mathématique de base de ce problème se résume aux équations d'Euler avec diffusion de la chaleur. Ce type de modèle se rencontre aussi bien dans l'étude de la dynamique des fronts de flamme [6], que pour la dynamique de l'ablation de fronts par laser [17], [9]. Les équations s'écrivent :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \text{div} (F(W) - F_{th}(W)) = S(x) \quad (1)$$

où $U = (\rho, \rho \vec{u}, \rho E)^T$ est le vecteur des variables conservées, F est le flux eulérien, F_{th} est le flux thermique obtenu à partir de la loi de Fourier

$F_{th} = (0, \vec{0}, \lambda \nabla T)$ et S le terme source dû au rayonnement. Dans le reste de cette étude, ce terme source sera pris égal à zéro puisque aucun couplage radiatif n'est considéré. L'énergie totale est définie par $E = e + 1/2 \vec{u} \cdot \vec{u}$. La loi d'état de chaque matériau fournit la pression $P = P(\rho, e)$ en fonction d'un certain nombre de constantes différentes d'un matériau à l'autre.

Comme d'habitude dans ce type de problème, la première difficulté réside dans la non linéarité des ondes et autres phénomènes couplée au fait que les lois d'état des matériaux sont très différentes de part et d'autre des interfaces. Ce type de difficulté a déjà été considéré au travers de trois formulations différentes dans Abgrall [1], Saurel et Abgrall [19],[18], Saurel et LeMetayer [20], Abgrall, Nkonga et Saurel [3], Abgrall et Karni [2].

Une nouvelle difficulté apparaît ici en raison du front d'ablation. Sur ce front, l'hydrodynamique est fortement couplée à la diffusion de la chaleur et au dépôt d'énergie rayonnée. Ces phénomènes sont fortement liés à une variable thermodynamique qui ne jouait pas un grand rôle dans les travaux précités : la température. Nous allons donc nous focaliser dans un premier temps sur une évaluation des différentes méthodes présentées dans les références précédentes pour la détermination de la température, en particulier aux interfaces, en vue de modéliser les transferts diffusifs. En effet, même si le dépôt d'énergie ne se fait pas exactement sur une interface mais légèrement à l'intérieur d'un des fluides, les éventuelles erreurs numériques dans le calcul de la température aux interfaces ne doivent pas venir polluer le reste de l'écoulement et de la solution.

Le présent document est organisé ainsi. Dans un premier temps nous effectuons quelques rappels de thermodynamique concernant les lois d'état des matériaux qui seront utilisées ici. Ensuite nous présentons les différents modèles mathématiques assortis de leur schéma de discrétisation pour le calcul de toutes les variables de l'écoulement (y compris la température). Ceci nous permettra de statuer sur certains modèles et d'en proposer de nouveaux.

Ceci étant réalisé, on retient le modèle le mieux adapté au problème pour lequel on va traiter les aspects diffusifs.

Signalons que nous nous restreindrons à une mise en œuvre 1D de ces modèles. De même, nous considérerons uniquement des stratégies de résolution strictement eulériennes, conformément à ce qui a été développé dans les références précitées. Les autres types de méthodes envisageables sont partiellement discutées dans Saurel et Abgrall [18], Saurel et LeMetayer [20] et Benson [5].

Les méthodes seront toujours exposées en 1D et à l'ordre 1, sachant que les ingrédients nécessaires aux extensions en multi-D et à des ordres supérieurs sont données dans les références précitées.

Après le rappel de thermodynamique qui suit, nous allons présenter une suite de modèles en commençant par un modèle que nous avons qualifié de minimum, puis nous examinerons un modèle multiphasique très complet. Les enseignements tirés de ces deux modèles nous permettront de proposer un modèle multiphasique réduit d'une résolution plus aisée et d'une précision intéressante. Nous examinerons ensuite une stratégie de résolution différente, basée sur une méthode à deux flux, que nous appliquerons à des modèles assez semblables.

2 Thermodynamique et lois d'état

Chaque matériau est supposé obéir à la loi d'état du " gaz raide ". Cette loi d'état est efficace pour reproduire le comportement hydrodynamique de gaz, liquides et solides com-

pressibles.

Pour spécifier complètement un état thermodynamique il faut disposer de deux lois d'état (thermique et calorique), ou de l'expression de l'énergie libre. On utilisera ici la loi d'état thermique (qui permet le calcul de la pression) et la loi d'état calorique (qui permet le calcul de la température). La première s'écrit :

$$e = (P + \gamma P_\infty)/(\rho(\gamma - 1)) + e_0 - (P_0 + \gamma P_\infty)/(\rho_0(\gamma - 1)) \quad (2)$$

Les constantes γ et P_∞ sont très différentes d'un matériau à l'autre. Les autres constantes : P_0 , ρ_0 et e_0 représentent respectivement la pression, la densité et l'énergie du matériau dans les conditions standard. La seconde loi d'état s'écrit :

$$T = \frac{P + P_\infty - (\rho/\rho_0)^\gamma (P_0 + P_\infty)}{\rho(\gamma - 1)C_v} + T_0(\rho/\rho_0)^{\gamma-1} \quad (3)$$

La capacité calorifique à volume constant de chaque matériau est supposée constante (mais différente d'un matériau à l'autre) et est notée C_v .

Lorsque les constantes P_0 et P_∞ sont prises égales à zéro, on retrouve aisément la formulation gaz parfait.

Ces équations d'état peuvent être écrites sous la formulation Mie-Gruneisen qui est à la fois plus générale et plus pratique :

$$e(\rho, T) = e_j(\rho) + C_v T \quad (4)$$

et

$$P(\rho, T) = P_j(\rho) + \rho \Gamma C_v T \quad (5)$$

Par combinaison des deux lois d'état on obtient aussi :

$$P(\rho, e) = P_j(\rho) + \rho \Gamma (e - e_j(\rho))$$

Pour la formulation stiffened gas, les différentes fonctions s'écrivent :

$$e_j(\rho) = c_0 + P_\infty/\rho$$

$$P_j(\rho) = -P_\infty$$

avec

$$c_0 = e_0 - (P_0 + \gamma P_\infty)/(\rho_0(\gamma - 1))$$

et

$$\Gamma = \gamma - 1$$

La thermodynamique de chaque matériau pur est ainsi complètement déterminée. *La difficulté réside maintenant dans le calcul des mêmes variables thermodynamiques dans les zones de diffusion numériques produites aux interfaces. En effet, tout schéma eulérien diffuse artificiellement les discontinuités de contact (ou interfaces) et produit donc un mélange artificiel pour lequel la détermination de l'état thermodynamique est difficile.* Pour ce faire, nous allons examiner plusieurs modèles d'écoulement.

3 Modèle minimum

Ce premier modèle, comme les modèles suivants sont d'abord évalués en absence de diffusion de la chaleur : on se focalise sur le calcul des variables cinématiques et thermodynamiques de l'écoulement.

La description complète du "modèle minimum" et de la méthode de résolution peut être consultée dans une série d'articles par Abgrall [1], Saurel et Abgrall [18] et Abgrall, Nkonga et Saurel [3]. Nous ne reprenons ici que les ingrédients essentiels et examinons le problème du calcul de la température.

Afin d'alléger la présentation, on considère que chaque fluide est régi par la loi d'état des gaz parfaits :

$P = (\gamma - 1)\rho e$ et $e = C_v T$. Tous les calculs peuvent être repris sans difficulté en utilisant la formulation stiffened gas.

Les paramètres des équations d'état étant discontinus d'un matériau à l'autre et ces derniers étant mobiles, les paramètres thermodynamiques doivent être considérés comme des fonctions de l'espace et du temps : $\gamma = \gamma(x, t)$ et $C_v = C_v(x, t)$. Le modèle à résoudre est donc constitué des équations d'Euler, et de deux équations traduisant l'évolution des phases. En 1D il s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + P}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial u(\rho E + P)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \gamma}{\partial t} + u \frac{\partial \gamma}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial C_v}{\partial t} + u \frac{\partial C_v}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \tag{6}$$

La partie conservative de ce modèle, constituée des trois premières équations, va être discrétisée par le schéma de Godunov [13] alors que le schéma pour la partie non conservative est à déterminer. Notons $W = (\rho, \rho u, \rho E)^T$ le vecteur des variables conservatives. Le schéma de Godunov s'écrit :

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \lambda(F_+^* - F_-^*) \tag{7}$$

où U_i est la valeur moyenne des inconnues dans la maille, F^* le flux solution du problème de Riemann exact et le rapport du pas de temps et du pas d'espace est noté $\lambda = \Delta t / \Delta x$. Les exposants n et $n + 1$ désignent deux instants successifs, les indices $+$ et $-$ sont relatifs aux bords de maille droit et gauche d'une cellule de calcul.

La méthode est exposée dans le cadre du schéma de Godunov basé sur un solveur de Riemann exact pour les équations d'Euler fermées par l'équation d'état stiffened gas, mais beaucoup d'autres solveurs peuvent être employés.

L'idée de base de cette méthode est de déterminer le schéma de discrétisation des équations non conservatives en s'assurant que les conditions d'interface vont être satisfaites.

Pour cela on se place sur une situation simplifiée où initialement l'écoulement évolue dans un champ de pression et de vitesse uniforme dans l'espace. Par contre, la densité, l'énergie interne, l'entropie et les paramètres des équations d'état sont discontinus au travers de l'interface. Dans ces conditions, un tel écoulement ne doit pas évoluer en pression ni en vitesse au cours du temps.

En présentant cette idée autrement, on sait que sur les mailles proches de l'interface (figure 2), l'égalité des vitesses et des pressions doit être satisfaite puisqu'il s'agit des conditions d'interface. On veut s'assurer que le solveur d'écoulement est au moins capable de maintenir ce type de conditions si elles sont satisfaites initialement.

$$u_{i-1} = u_i = u_{i+1} = u \text{ et } P_{i-1} = P_i = P_{i+1} = P$$

mais

$$\rho_{i-1} \neq \rho_i \neq \rho_{i+1}; e_{i-1} \neq e_i \neq e_{i+1}; \gamma_{i-1} = \gamma_i \neq \gamma_{i+1} \text{ etc.}$$

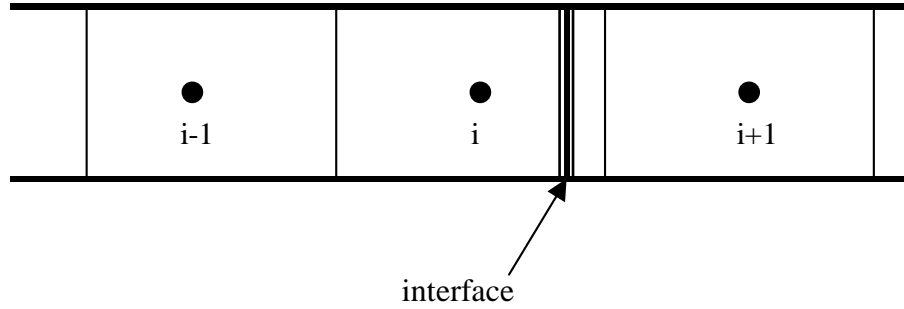


FIG. 2 – Cellules de calcul autour de l'interface. Les champs de vitesse et de pression sont supposés uniformes (en accord avec les conditions d'interface) mais les autres variables sont discontinues.

Successivement nous allons observer les différentes opérations effectuées par le schéma de Godunov pour chaque équation, dans ce cas particulier d'écoulement.

L'équation de conservation de la masse discrète s'écrit :

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \lambda(\rho u_+^* - \rho u_-^*)$$

ce qui devient, compte tenu du champ uniforme de vitesse :

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \lambda u(\rho_+^* - \rho_-^*)$$

On applique le même type de raisonnement à l'équation du mouvement en tenant compte des conditions d'uniformité de vitesse et de pression. On obtient alors :

$$u_i^{n+1} = u_i^n$$

Ce résultat est celui qui était attendu. Il signifie que la vitesse n'aura aucune évolution. On examine maintenant l'équation d'énergie. Après quelques simplifications on obtient :

$$\rho e_i^{n+1} = \rho e_i^n - \lambda u(\rho e_+^* - \rho e_-^*)$$

En utilisant maintenant l'équation d'état thermique, chaque produit de la densité par l'énergie interne s'écrit : $\rho e = P/(\gamma - 1)$. En introduisant la variable $\beta = 1/(\gamma - 1)$ on obtient :

$$\beta P_i^{n+1} = \beta P_i^n - \lambda u(\beta P_+^* - \beta P_-^*)$$

Cette dernière équation indique que pour que la pression reste uniforme à l'instant suivant, il est nécessaire que la variable β soit obtenue par la formule :

$$\beta_i^{n+1} = \beta_i^n - \lambda u(\beta_+^* - \beta_-^*) \quad (8)$$

qui est en fait une discrétisation de l'équation

$$\frac{\partial 1/(\gamma - 1)}{\partial t} + u \frac{\partial 1/(\gamma - 1)}{\partial x} = 0$$

équivalente à

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} + u \frac{\partial \gamma}{\partial x} = 0$$

Ce schéma a montré son efficacité pour la restitution des conditions d'interface y compris pour des situations où l'écoulement n'est pas uniforme en pression ni en vitesse initialement. Il a été utilisé pour des lois d'état diverses (Shyue [23]), des problèmes de dynamique des chocs et interfaces et des problèmes de détonique et d'écoulement réactifs (Abgrall, Nkonga et Saurel [3]). Il s'agit donc d'un schéma éprouvé pour les aspects dynamiques de l'écoulement. Nous allons maintenant examiner sa capacité à déterminer le champ thermique. Reprenons le précédent résultat concernant l'équation d'énergie :

$$\rho e_i^{n+1} = \rho e_i^n - \lambda u(\rho e_+^* - \rho e_-^*)$$

En vertu de l'équation d'état calorique, on peut remplacer l'énergie interne par une fonction de la température : $e = C_v T$. Ainsi :

$$(\rho C_v T)_i^{n+1} = (\rho C_v T)_i^n - \lambda u((\rho C_v T)_+^* - (\rho C_v T)_-^*)$$

L'observation de ce dernier résultat ne permet d'obtenir aucune indication sur le schéma de discrétisation de l'équation non conservative sur C_v . En effet, les fonctions ρ , C_v , T sont toutes discontinues et aucun découplage n'apparaît. Dans le cas très particulier où la température des deux milieux est commune et uniforme, on a comme indication :

$$(\rho C_v)_i^{n+1} = (\rho C_v)_i^n - \lambda u((\rho C_v)_+^* - (\rho C_v)_-^*)$$

Comme C_v est un paramètre matériel qui obéit à l'équation d'évolution

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} + u \frac{\partial C_v}{\partial x} = 0$$

le précédent résultat nous incite à considérer cette équation sous la forme conservative obtenue par combinaison avec l'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho C_v}{\partial t} + \frac{\partial \rho C_v u}{\partial x} = 0$$

En l'absence d'un guide clair pour la discrétisation de l'équation sur C_v nous avons effectué certains test numériques. La discrétisation conservative :

$$(\rho C_v)_i^{n+1} = (\rho C_v)_i^n - \lambda((\rho C_v u)_+^* - (\rho C_v u)_-^*)$$

a été testé dans le cas gaz parfait et s'est avérée produire des résultats oscillants sur T . Nous avons alors abandonné cette formulation et testé le schéma non conservatif :

$$C_{v_i}^{n+1} = C_{v_i}^n - \lambda u(C_{v_+}^* - C_{v_-}^*)$$

qui correspond directement à $\frac{\partial C_v}{\partial t} + u \frac{\partial C_v}{\partial x} = 0$.

Il s'est avéré donner de très bons résultats dans le cas gaz parfait. Nous avons alors poursuivi l'analyse pour l'équation d'état stiffened gas. Souvenons nous que dans ce cas l'équation d'état calorique s'écrit :

$$e(\rho, T) = e_j(\rho) + C_v T$$

avec

$$e_j(\rho) = c_0 + P_\infty / \rho$$

Il apparaît donc ici que la seule discrétisation de C_v n'est pas suffisante. Une nouvelle fonction de x et t est introduite : $c_0 = c_0(x, t)$. En cherchant à appliquer les mêmes principes que précédemment, aucun guide n'apparaît pour la discrétisation de cette dernière équation. Comme précédemment nous avons testé une formulation conservative

$$\frac{\partial \rho c_0}{\partial t} + \frac{\partial \rho c_0 u}{\partial x} = 0$$

résolue par le schéma de Godunov et une formulation non conservative

$$\frac{\partial c_0}{\partial t} + u \frac{\partial c_0}{\partial x} = 0$$

résolue par le schéma non conservatif utilisé précédemment pour le calcul de γ . Les meilleurs résultats ont été obtenus avec le second schéma, et ne sont toutefois pas exempts d'oscillations. Sur un problème de tube à choc liquide/gaz nous avons représenté le comportement typique de la solution. Signalons qu'il s'agit dans l'absolu d'un cas test très raide représentatif des conditions extrêmes de l'application qui nous intéresse.

Le tube à choc est constitué d'une chambre contenant initialement du liquide à haute pression de l'abscisse $x = 0$ à $x = 0.7m$. Sur l'autre partie du tube, à droite jusqu'à l'abscisse $x = 1m$, il contient initialement un gaz. Les données initiales et les paramètres d'équation d'état du liquide et du gaz sont :

	<i>Liquide</i>	<i>Gaz</i>
$\rho(kg/m^3)$	1000	50
$P(Pa)$	10^9	10^5
$u(m/s)$	0	0
γ	4.4	1.4
$P_\infty(Pa)$	6×10^8	0
$C_v(J/kg/K)$	4180	1000
$\rho_0(kg/m^3)$	1000	50
$P_0(Pa)$	10^5	10^5

Les résultats de la simulation sont représentés sur la figure 3 à l'instant 338 ms sur un maillage comportant 1000 cellules de calcul. La solution exacte est représentée en symboles épais et la solution numérique en symboles fins. Ce test est d'un intérêt particulier puisqu'il fait intervenir les 3 types d'ondes possibles : une forte détente remontant dans la chambre haute pression de gauche, un choc se propageant dans la chambre basse pression de droite et l'interface se propageant entre les deux. Il apparaît clairement que toutes les variables de l'écoulement sont correctement calculées, sauf la température qui souffre d'une forte oscillation à l'interface.

A ce stade, il ne nous est pas possible de conclure sur cette formulation. Une discrétisation correcte de la température est peut être possible, mais aucun guide clair ne nous semble disponible. C'est pourquoi nous préférons abandonner cette formulation et en examiner d'autres.

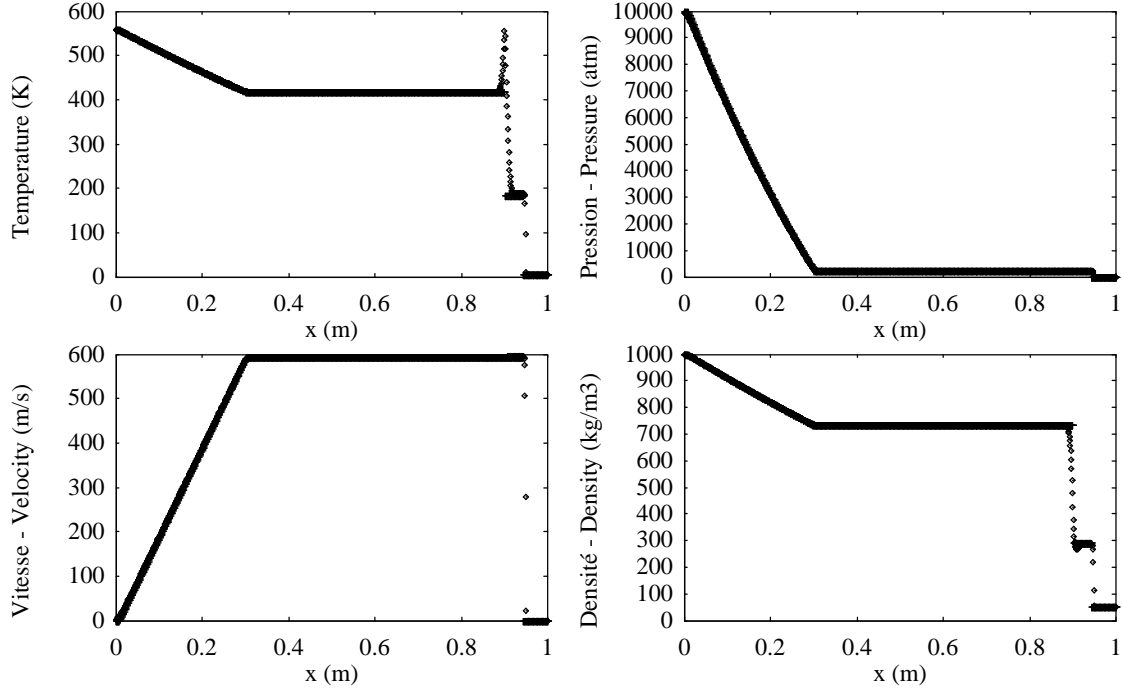


FIG. 3 – Tube à choc liquide/gaz. Modèle minimum. Solution exacte en traits épais. Solution numérique en symboles. Maillage à 1000 cellules.

4 Modèle multiphasique

La description complète de ce modèle et de la méthode de résolution peut être consultée dans les articles par Saurel et Abgrall [18] et Saurel et LeMetayer [20]. De même que précédemment, nous ne rappelons ici que les ingrédients essentiels et examinons le problème du calcul de la température.

Pour obtenir les équations du modèle multiphasique on utilise la méthode d'homogénéisation de Drew et Passman [8] appliquée aux équations de Navier Stokes compressibles de chaque composant. On néglige ensuite les termes dissipatifs partout sauf aux interfaces à l'échelle microscopique. Cette procédure de prise de moyenne ne permet pas d'obtenir strictement tous les termes des équations qui vont être présentés sans une étape de modélisation de certains produits de fonctions de corrélation. Le modèle qui en résulte est décrit et résolu dans Saurel et Abgrall [18]. Une autre méthode pour obtenir ces équations a été développée récemment par Gavriluk et Saurel [12]. Cette méthode est basée sur le principe de Hamilton de moindre action. Ce modèle est plus général que celui qui va être utilisé ici. En particulier il tient compte des effets inertiels à l'échelle microscopique, et de leurs couplages avec les effets à l'échelle macroscopique. Ce modèle est obtenu de façon très rigoureuse sans nécessité de modélisation de certains produits de fonctions de corrélation. Il ne sera pas présenté ici car sans intérêt pour la présente application. En effet, pour la modélisation de problèmes à interfaces, le sous modèle que nous utilisons élimine les effets inertiels ce qui en facilite la résolution.

Le présent modèle est composé d'un système de 4 équations aux dérivées partielles pour chaque phase k .

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + u_i \nabla \alpha_k &= \mu(P_k - P'_k) \\
\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla(\alpha_k \rho_k u_k) &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_k \rho_k u_k}{\partial t} + \nabla(\alpha_k \rho_k u_k \otimes u_k + \alpha_k P_k) &= P_i \nabla \alpha_k + F_{dk} \\
\frac{\partial \alpha_k \rho_k E_k}{\partial t} + \nabla(u_k (\alpha_k \rho_k E_k + \alpha_k P_k)) &= P_i u_i \nabla \alpha_k + F_{dk} u_i + Q_{ki} - \mu P_i (P_k - P'_k)
\end{aligned} \tag{9}$$

avec les conditions d'interfaces moyennées :

$$\begin{aligned}
\sum_k P_i \nabla \alpha_k + F_{dk} &= 0 \\
\sum_k P_i u_i \nabla \alpha_k + F_{dk} u_i - \mu P_i (P_k - P'_k) &= 0
\end{aligned}$$

Les notations sont classiques dans la littérature sur les écoulements multiphasiques. La fraction volumique α_k est définie par le volume occupé par la phase k sur le volume total. La contrainte de saturation impose $\sum \alpha_k = 1$. Les densité, vitesse, pression et énergie totale sont représentées par ρ, u, P et $E = e + 1/2 u u$. Les indices k et i sont relatifs à la phase k et aux variables d'interface moyennées.

Notons que dans l'approche multiphasique, les constantes des équations d'état ne sont plus des fonctions de l'espace et du temps comme pour le premier modèle : ici ce sont des constantes pures. Ceci simplifiera grandement le calcul de la température en particulier, et en fait de toutes les variables thermodynamiques, y compris dans les zones de mélange numérique.

Les membres de gauche des ces équations sont classiques. Dans les membres de droite apparaissent la force de traînée F_{dk} (qui jouera un rôle important) et les termes non conservatifs $P_i \nabla \alpha_k$ et $P_i u_i \nabla \alpha_k$. Les termes $\mu(P_k - P'_k)$ et $\mu P_i (P_k - P'_k)$ sont liés au processus de relaxation des pressions. Ils sont d'une importance capitale. Les termes liés au transfert de masse et de chaleur n'ont pas été considérés car sans importance ici.

Ces termes se justifient par une analyse de l'inégalité d'entropie du système. La variable d'homogénéisation μ est liée à la nature des matériaux, à leur équation d'état, vitesse du son, topologie de l'interface etc. Il s'agit d'une fonction très complexe à déterminer dans le cas général. En pratique, il est seulement important de comprendre que cette variable contrôle la vitesse à laquelle l'équilibre des pressions est atteint. Dans la grande majorité des situations physiques mettant en jeu des mélanges de fluides, cet équilibre est atteint très rapidement. Très rapidement signifie en fait plus rapidement que le pas de temps hydrodynamique. En particulier aux interfaces, l'équilibre doit être instantané afin de satisfaire la condition d'interface en pression. Pour de nombreuses autres situations (détonations, chocs dans les alliages solides, cavitation etc.) l'hypothèse d'une relaxation instantanée des pressions est encore valide. Ainsi en pratique la connaissance de la fonction μ n'est pas nécessaire.

Avant d'entrer dans le détail des termes qui vont être particulièrement importants donnons une image simple des termes non conservatifs $P_i \nabla \alpha_k$ et $P_i u_i \nabla \alpha_k$.

Les équations d'Euler moyennées sur la section droite d'une tuyère notée A , en absence de transfert de masse, quantité de mouvement et énergie s'écrivent :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial A \rho}{\partial t} + \frac{\partial (A \rho u)}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial A \rho u}{\partial t} + \frac{\partial A (\rho u^2 + P)}{\partial x} &= P \frac{\partial A}{\partial x} \\
\frac{\partial A \rho E}{\partial t} + \frac{\partial A u (\rho E + P)}{\partial x} &= -P \frac{\partial A}{\partial x}
\end{aligned} \tag{10}$$

Dans un système diphasique, la fraction volumique α peut être aussi vue comme une fraction surfacique. En admettant cette analogie et en remplaçant la dérivée temporelle $\frac{\partial A}{\partial t}$ par la dérivée spatiale $u \frac{\partial A}{\partial x}$ à l'aide de la première équation du système multiphasique, on retrouve les mêmes équations pour le modèle 1D d'équations d'Euler moyennées et le modèle multiphasique.

Ceci signifie que les termes non conservatifs du modèle multiphasique jouent le même rôle que les termes de variation de section. Cette image simple peut être utile pour l'établissement de schémas numériques, ou l'analyse de solutions.

Ceci signifie aussi que la modèle multiphasique "couple" plusieurs systèmes d'équations d'Euler dans des conduits de section variable. Ces "conduits" ont des parois perméables aux différents transferts, se déplacent à la vitesse moyenne interfaciale u_i , s'élargissent ou rétrécissent en fonction du différentiel de pression $\mu(P_k - P'_k)$ à une vitesse contrôlée par μ .

4.1 Relations de fermeture

Les seules relations de fermeture qui seront examinées ici sont celles qui sont importantes pour la présente application : u_i , P_i , $\mu(P_k - P'_k)$ et F_{dk} .

Moyenne des pressions aux interfaces

Dans notre approche, chaque phase est considérée compressible avec sa propre pression, énergie interne et densité. Considérer chaque phase compressible garantit l'hyperbolicité inconditionnelle du modèle, tant que les expressions de u_i et P_i sont des fonctions ne faisant intervenir aucune dérivée des autres variables. Ainsi, il y a une certaine liberté dans le choix des moyennes des grandeurs aux interfaces par rapport à l'hyperbolicité.

Pour la présente application, les pressions et les vitesses seront relaxées instantanément durant la résolution numérique. Ainsi, notre stratégie est de choisir ces variables le plus proche possible de l'état relaxé. Un choix préservant la symétrie est aussi préféré. Une estimation raisonnable qui considère la compressibilité de chaque phase et qui préserve la symétrie est de prendre la moyenne des pressions aux interfaces égale à la pression dynamique de mélange :

$$P_i = \sum \alpha_k (P_k + \rho_k (V_i - u_k)^2)$$

Ce choix est aussi motivé par l'analyse des invariants de Riemann du modèle qui ne sera pas détaillée ici.

Les pressions de chaque phase P_k sont données par des équations d'état appropriées : $P_k = P_k(\rho_k, e_k)$.

Vitesse d'interface moyenne

Pour les mêmes raisons que précédemment on retient pour la moyenne des vitesses aux interfaces la vitesse du centre de masse :

$$u_i = \sum \alpha_k \rho_k u_k / \sum \alpha_k \rho_k$$

Termes de relaxation des pressions

Le modèle contient des termes non classiques concernant le processus de relaxation des pressions $\mu(P_k - P'_k)$ dans l'équation sur la fraction volumique et $\mu P_i(P_k - P'_k)$ dans l'équation d'énergie.

Le premier terme représente le taux d'expansion ou contraction de la fraction de volume α_k afin que les pressions tendent vers l'équilibre. La signification physique de ce terme est simple. Si les différentes phases ne sont pas en équilibre de pression après passage des ondes alors le volume des phases évoluera jusqu'à ce que les pressions soient à l'équilibre. La variable μ contrôle la vitesse à laquelle l'équilibre est atteint.

Lorsque les pressions ne sont pas en équilibre, les entités élémentaires de fluide (bulles, gouttes, etc.) ont un mouvement tridimensionnel à l'échelle microscopique provoquant un changement de volume afin que les pressions tendent vers l'équilibre. Ce mouvement 3D à l'échelle microscopique n'a pas été considéré dans les vitesses moyennes des phases et dans notre estimation de la vitesse moyenne des interfaces. La vitesse moyenne des interfaces présente dans la première équation du modèle est en fait une vitesse translationnelle à l'échelle macroscopique. Introduire une variation de volume fonction du différentiel de pression revient à corriger ce choix un peu trop simple de vitesse moyenne des interfaces et à récupérer des informations du milieu microscopique.

Dans l'absolu, la variable d'homogénéisation μ dépend de la compressibilité de chaque fluide (et donc de leurs équations d'état), de leur nature, de leurs vitesses à l'échelle microscopique et de la topologie de l'interface. Il s'agit donc d'une fonction extrêmement difficile à déterminer. Mais pour la plupart des applications, et en particulier pour la présente, cette variable peut être considérée infinie.

Sur une interface les pressions de part et d'autre doivent être égales à chaque instant. Si ce coefficient est infiniment grand, cette condition sera réalisée à chaque instant, en particulier à l'intérieur de la zone de diffusion numérique qu'est l'interface. C'est ce qui a été proposé dans Saurel et Abgrall [18].

Termes de relaxation des vitesses

Ces termes de relaxation sont très classiques dans les écoulements diphasiques et sont représentés par la force F_{dk} . Ce qui est moins classique dans notre approche est de les considérer à taux infini.

Une force de traînée générale peut être mise sous la forme :

$$F_{dk} = \lambda_k(u_k - u'_k)$$

où λ_k est une fonction positive. Elle contrôle la vitesse à laquelle les vitesses tendent vers l'équilibre. Dans certaines situations physiques, cette fonction tend vers l'infini (voir Saurel et LeMetayer [20], Kapila *et al.* [15]).

Par ailleurs, pour des raisons purement numériques durant la résolution de problèmes à interfaces nous avons montré que certaines pertes d'information (directions caractéristiques perdues) pouvaient être remplacées par des termes de relaxation.

Dans le paragraphe précédent, l'égalité des pressions était assurée par l'utilisation d'un coefficient de relaxation des pressions infini. Pour restituer la seconde condition d'interface (égalité des vitesses) un coefficient de traînée infini doit être utilisé.

4.2 Méthode numérique

La méthode numérique est complètement détaillée dans Saurel et Abgrall [18] et étendue au cas 2D dans Saurel et LeMetayer [20]. Elle reprend les mêmes idées de base que celles qui ont été utilisées pour le modèle du chapitre précédent (modèle minimum). Ces pourquoi nous ne rappellerons ici que les résultats essentiels et détaillerons un peu plus les ingrédients spécifique au présent problème qui fait intervenir plus de deux fluides.

Dans le contexte d'un schéma d'ordre 1, nous avons besoin de deux intégrateurs pour atteindre la solution [21].

$$U_i^{n+1} = L_R^{\Delta t} L_H^{\Delta t} U_i^n$$

L'opérateur de relaxation à taux infini L_R n'est pas toujours trivial à développer. On donnera les ingrédients nécessaires pour un problème à nombre arbitraire de fluides.

La difficulté essentielle réside dans le solveur hyperbolique L_H que nous rappelons maintenant. Il est basé sur une discrétisation des flux conservatifs en utilisant le solveur HLL. Ce solveur est bien sûr diffusif mais permet de comprendre aisément le comportement de la méthode et en particulier la stratégie employée pour les termes non conservatifs. L'approche qui est présentée pourrait s'étendre à tout type de solveur de Riemann préservant les solutions uniformes en vitesse et en pression. Ainsi, des solveurs tels que développés par Dubroca [10], Gallice [11] seraient utilisables et amélioreraient la précision. Une autre voie est actuellement à l'étude (Abgrall et Saurel [4]). Cette nouvelle approche assure un traitement précis et efficace des équations et termes non conservatifs, même en présence de choc. Elle préserve aussi la dynamique de toutes les ondes du système, en particulier les discontinuités de contact. Ce travail est en cours d'achèvement et ne sera pas présenté ici.

Opérateur hyperbolique

Le système hyperbolique contient certaines difficultés. Des équations et des termes non conservatifs sont présents. L'idée que nous allons utiliser pour déterminer la discrétisation de ces termes est la même que celle utilisée pour le modèle minimum, appliquée ici à un écoulement multiphasique.

Si un écoulement multiphasique évolue sous des conditions uniformes de vitesse et de pression, il doit rester uniforme sur ces mêmes variables au cours de son évolution temporelle.

En 1D les équations à résoudre s'écrivent :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + u_i \frac{\partial \alpha_k}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} &= H(U) \frac{\partial \alpha_k}{\partial x} \end{aligned}$$

avec $U = (\alpha_k \rho_k, \alpha_k \rho_k u_k, \alpha_k \rho_k E_k)^T$,

$$F(U) = (\alpha_k \rho_k u_k, \alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k P_k, u_k (\alpha_k \rho_k E_k + \alpha_k P_k))^T,$$

et $H(U) = (0, P_i, P_i u_i)$.

Nous allons résoudre ces équations avec un schéma de type Godunov en utilisant le solveur HLL. Sur un bord de maille séparant un état de droite (R) et un état de gauche (L), le flux correspondant s'écrit :

$$F^* = (S_R F_L - S_L F_R + S_R S_L (U_R - U_L)) / (S_R - S_L) \quad (11)$$

Où les vitesses d'ondes S_R et S_L sont estimées par :

$$S_R = \text{Max}_k(0, (u_k + c_k)_R, (u_k + c_k)_L) \text{ et } S_L = \text{Min}_k(0, (u_k - c_k)_R, (u_k - c_k)_L)$$

On développe maintenant le schéma de Godunov pour le système quasi-conservatif constitué des équations de masse, quantité de mouvement et énergie de chaque phase, sous des conditions de pression et vitesse uniformes.

Le schéma de Godunov s'écrit :

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \lambda (F_{i+1/2}^* - F_{i-1/2}^*) + H(U_i^n) \Delta$$

où Δ représente l'approximation numérique de $\frac{\partial \alpha_k}{\partial x}$ que nous allons déterminer par la suite.

On commence les développements avec l'équation de conservation de la masse :

$$(\alpha_k \rho_k)_i^{n+1} = (\alpha_k \rho_k)_i^n - \lambda \Omega$$

avec

$$\begin{aligned} \Omega = & (S_{i+1/2}^R (\alpha_k \rho_k u_k)_i^n - S_{i+1/2}^L (\alpha_k \rho_k u_k)_{i+1}^n + S_{i+1/2}^R S_{i+1/2}^L ((\alpha_k \rho_k)_{i+1}^n - ((\alpha_k \rho_k)_i^n) \\ & / (S_{i+1/2}^R - S_{i+1/2}^L) \\ & - (S_{i-1/2}^R (\alpha_k \rho_k u_k)_{i-1}^n - S_{i-1/2}^L (\alpha_k \rho_k u_k)_i^n + S_{i-1/2}^R S_{i-1/2}^L ((\alpha_k \rho_k)_i^n - ((\alpha_k \rho_k)_{i-1}^n) \\ & / (S_{i-1/2}^R - S_{i-1/2}^L)) \end{aligned}$$

En supposant $u_{k_{i-1}}^n = u_{k_i}^n = u_{k_{i+1}}^n = u$ on obtient :

$$\begin{aligned} \Omega = & (u (S_{i+1/2}^R (\alpha_k \rho_k)_i^n - S_{i+1/2}^L (\alpha_k \rho_k)_{i+1}^n) + S_{i+1/2}^R S_{i+1/2}^L ((\alpha_k \rho_k)_{i+1}^n - ((\alpha_k \rho_k)_i^n) \\ & / (S_{i+1/2}^R - S_{i+1/2}^L) \\ & - (u (S_{i-1/2}^R (\alpha_k \rho_k)_{i-1}^n - S_{i-1/2}^L (\alpha_k \rho_k)_i^n) + S_{i-1/2}^R S_{i-1/2}^L ((\alpha_k \rho_k)_i^n - ((\alpha_k \rho_k)_{i-1}^n) \\ & / (S_{i-1/2}^R - S_{i-1/2}^L)) \end{aligned}$$

On considère maintenant l'équation du mouvement. En supposant l'uniformité des pressions $P_{k_{i-1}}^n = P_{k_i}^n = P_{k_{i+1}}^n = P$ on obtient :

$$(\alpha_k \rho_k u_k)_i^{n+1} = (\alpha_k \rho_k u_k)_i^n - \lambda \Psi + \Delta t P \Delta$$

où

$$\begin{aligned}
\Psi = & u(u(S_{i+1/2}^R(\alpha_k \rho_k)_i^n - S_{i+1/2}^L(\alpha_k \rho_k)_{i+1}^n) + S_{i+1/2}^R S_{i+1/2}^L((\alpha_k \rho_k)_{i+1}^n - ((\alpha_k \rho_k)_i^n) \\
& / (S_{i+1/2}^R - S_{i+1/2}^L) \\
& + P(S_{i+1/2}^R(\alpha_k)_i^n - S_{i+1/2}^L(\alpha_k)_{i+1}^n) / (S_{i+1/2}^R - S_{i+1/2}^L) \\
& - u(u(S_{i-1/2}^R(\alpha_k \rho_k)_{i-1}^n - S_{i-1/2}^L(\alpha_k \rho_k)_i^n) + S_{i-1/2}^R S_{i-1/2}^L((\alpha_k \rho_k)_i^n - ((\alpha_k \rho_k)_{i-1}^n) \\
& / (S_{i-1/2}^R - S_{i-1/2}^L) \\
& - P(S_{i-1/2}^R(\alpha_k)_{i-1}^n - S_{i-1/2}^L(\alpha_k)_i^n) / (S_{i-1/2}^R - S_{i-1/2}^L)
\end{aligned}$$

En combinant les équations de masse et d'énergie il apparaît clairement que pour que la vitesse reste uniforme à l'instant t_{n+1} il est nécessaire que les termes non conservatifs soient discrétisés par :

$$\begin{aligned}
\Delta = & 1/\Delta x((S_{i+1/2}^R(\alpha_k)_i^n - S_{i+1/2}^L(\alpha_k)_{i+1}^n) / (S_{i+1/2}^R - S_{i+1/2}^L) \\
& - (S_{i-1/2}^R(\alpha_k)_{i-1}^n - S_{i-1/2}^L(\alpha_k)_i^n) / (S_{i-1/2}^R - S_{i-1/2}^L))
\end{aligned}$$

Ainsi est déterminée l'approximation numérique de $\frac{\partial \alpha_k}{\partial x}$.

On considère maintenant l'équation d'énergie. Après quelque manipulations on obtient :

$$(\alpha_k \rho_k e_k)_i^{n+1} = (\alpha_k \rho_k e_k)_i^n - \lambda \Phi$$

où

$$\begin{aligned}
\Phi = & u(S_{i+1/2}^R(\alpha_k \rho_k e_k)_i^n - S_{i+1/2}^L(\alpha_k \rho_k e_k)_{i+1}^n) \\
& + S_{i+1/2}^R S_{i+1/2}^L((\alpha_k \rho_k e_k)_{i+1}^n - (\alpha_k \rho_k e_k)_i^n) \\
& / (S_{i+1/2}^R - S_{i+1/2}^L) \\
& - u(S_{i-1/2}^R(\alpha_k \rho_k e_k)_{i-1}^n - S_{i-1/2}^L(\alpha_k \rho_k e_k)_i^n) \\
& + S_{i-1/2}^R S_{i-1/2}^L((\alpha_k \rho_k e_k)_i^n - (\alpha_k \rho_k e_k)_{i-1}^n) \\
& / (S_{i-1/2}^R - S_{i-1/2}^L)
\end{aligned}$$

Afin d'examiner l'évolution de la pression on introduit maintenant l'équation d'état. En utilisant l'équation d'état stiffened gas, chaque produit de la densité par l'énergie interne s'écrit : $\rho_k e_k = (P_k + \gamma_k P_{inf_k}) / (\gamma_k - 1)$. Puisque γ_k et P_{inf_k} sont des constantes par matériaux et que la pression P_k est uniforme, chaque produit $\rho_k e_k$ est constant. Ceci conduit au résultat suivant :

$$\alpha_{k_i}^{n+1} = \alpha_{k_i}^n - \lambda \left(\begin{aligned} & u((S_{i+1/2}^R \alpha_{k_i}^n - S_{i+1/2}^L \alpha_{k_{i+1}}^n) / (S_{i+1/2}^R - S_{i+1/2}^L) \\ & - (S_{i-1/2}^R \alpha_{k_{i-1}}^n - S_{i-1/2}^L \alpha_{k_i}^n) / (S_{i-1/2}^R - S_{i-1/2}^L)) \\ & + (S_{i+1/2}^R S_{i+1/2}^L (\alpha_{k_{i+1}}^n - \alpha_{k_i}^n) / (S_{i+1/2}^R - S_{i+1/2}^L) \\ & - S_{i-1/2}^R S_{i-1/2}^L (\alpha_{k_i}^n - \alpha_{k_{i-1}}^n) / (S_{i-1/2}^R - S_{i-1/2}^L)) \end{aligned} \right)$$

Cette équation n'est rien d'autre qu'une approximation numérique de $\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_k}{\partial x} = 0$.

Le terme facteur de u est de nouveau l'approximation de $\frac{\partial \alpha_k}{\partial x}$, et l'autre terme est un terme de viscosité numérique.

L'extension à l'ordre 2 et en 2D est détaillée dans Saurel et LeMetayer [20]. Le développement de cette méthode pour d'autres solveurs de Riemann se conduirait de la même manière. La discrétisation des équations et termes non conservatifs dépend du solveur utilisé.

Opérateurs de relaxation

Cette procédure est d'une importance capitale pour la restitution des conditions d'interface (égalité des pressions et des vitesses). Elle peut être très importante aussi pour le traitement des chocs dans les mélanges et des détonations d'explosifs solides, mais ceci est hors de propos.

Relaxation des vitesses

Après la propagation des ondes traitée par le solveur hyperbolique il est nécessaire de résoudre le système différentiel suivant pour la relaxation des vitesses:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k u_k}{\partial t} &= \lambda(u_{k'} - u_k) \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k E_k}{\partial t} &= \lambda u_i(u_{k'} - u_k)\end{aligned}$$

où le coefficient de relaxation λ tend vers l'infini.

La combinaison des équations de masse et du mouvement donne :

$\frac{\partial u_k}{\partial t} = \lambda(u_{k'} - u_k)/(\alpha_k \rho_k)$ pour la phase k et $\frac{\partial u_{k'}}{\partial t} = -\lambda(u_{k'} - u_k)/(\alpha_{k'} \rho_{k'})$ pour la phase k' . La soustraction de la première équation à la seconde et intégration conduit au résultat attendu : $u_k^* - u_{k'}^* = 0$. Ensuite, en sommant les mêmes équations et en intégrant on obtient la vitesse relaxée :

$$u_k^* = \sum (\alpha_k \rho_k u_k)_0 / \sum (\alpha_k \rho_k)_0$$

où l'exposant 0 indique la solution obtenue à partir du solveur hyperbolique.

On peut remarquer que cette vitesse correspond à la vitesse moyenne d'interface que nous avons proposé pour l'advection de la fraction volumique. Notons aussi que cette procédure est exacte, et est une extension triviale de la vitesse relaxée pour un système à deux fluides.

Il est ensuite nécessaire de corriger les énergies internes. La combinaison des équations de masse, du mouvement et de l'énergie conduit après une intégration exacte à :

$$e_k^* = e_{k0} + 1/2(u_k^* - u_{k0})^2$$

Il ne reste plus qu'à faire relaxer les pressions afin de restituer la seconde condition d'interface.

Opérateur de relaxation des pressions

On a proposé dans Saurel et Abgrall [18] une procédure valide pour deux fluides seulement. Le présent problème pouvant faire intervenir plus de deux fluides, il est nécessaire de généraliser cette procédure.

Pour chaque phase k on doit résoudre le système différentiel suivant :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} &= \mu(P_k - P_{k'}) \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k u_k}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k E_k}{\partial t} &= -\mu P_i (P_k - P_{k'})\end{aligned}$$

où le coefficient de relaxation μ tend vers l'infini.

La combinaison des équations sur la fraction volumique, masse, mouvement et énergie conduit à:

$$\alpha_k \rho_k \frac{\partial e_k}{\partial t} = -P_i \frac{\partial \alpha_k}{\partial t}$$

où P_i a été exprimée précédemment. Notons que la première loi de la thermodynamique est ici retrouvée.

Puisque $m_k = \alpha_k \rho_k = \text{const.}$ alors $d\alpha_k = -m_k d\rho_k / \rho_k^2$. L'équation d'énergie devient: $\frac{\partial e_k}{\partial t} = P_i \frac{\partial 1/\rho_k}{\partial t}$. Ensuite, en utilisant une approximation trapézoïdale: $e_k^* - e_k^0 = (P_i^* + P_i^0)/2(1/\rho_k^* - 1/\rho_k^0)$, où les variables marquées d'une astérisque sont les variables relaxées, et les variables marquées d'un 0 sont obtenues après relaxation des vitesses.

Ceci correspond à un système de N équations (N est le nombre de fluides) avec $2N+1$ inconnues: N énergies, N densités and P_i^* . Lorsque le paramètre de relaxation tend vers l'infini, toutes les pressions deviennent égales $P_k^* = P_{k'}^* = P_i^*$. Ainsi, il y a une seule pression à déterminer. Pour fermer le système nous avons aussi N équations d'état $e_k^* = e_k(P_i^*, \rho_k^*)$. La contrainte de saturation fournit la dernière équation $\sum \alpha_k = 1$. Le système à résoudre s'écrit (on supprime le symbole *):

$$\begin{aligned}2\rho_1 \rho_1^0 (e_1 - e_1^0) + (P_i + P_i^0)(\rho_1 - \rho_2^0) &= 0 \\ 2\rho_2 \rho_2^0 (e_2 - e_2^0) + (P_i + P_i^0)(\rho_2 - \rho_2^0) &= 0 \\ \dots & \\ 2\rho_N \rho_N^0 (e_N - e_N^0) + (P_i + P_i^0)(\rho_N - \rho_N^0) &= 0 \\ \sum m_k / \rho_k - 1 &= 0\end{aligned}$$

La solution de ce système non linéaire est obtenue par la méthode de Newton Raphson.

4.3 Retour vers les variables monofluide

Le modèle multiphasique permet la détermination des variables thermodynamiques de chaque phase en tout point y compris de la zone de diffusion numérique. Ce modèle étant utilisé ici pour la résolution d'un problème à interfaces il nous faut préciser comment sont déterminées les variables représentatives de la solution.

En ce qui concerne les pressions et les vitesses, aucune ambiguïté n'est possible puisque après relaxation les fluides évoluent sous une pression et vitesse commune en tout point.

La variable représentative du champ de densité est la densité de mélange définie par $\rho = \sum \alpha_k \rho_k$.

Le point le plus intéressant pour notre application est le calcul de la température. Comme nous l'avons déjà précisé, toutes les constantes des équations d'état ne sont plus dans cette représentation des fonctions de l'espace et du temps : ce sont des constantes pures. Ainsi la température "monofluide" sera en fait la température de mélange obtenue à partir de la définition de l'énergie de mélange. A partir de la définition de l'énergie totale du système multiphasique et compte tenu de l'équilibre des vitesses entre phase, on obtient que l'énergie interne du système s'écrit : $\rho e = \sum \alpha_k \rho_k e_k$. On utilise maintenant l'équation d'état calorique sous la formulation Mie-Grüneisen $e_k(\rho_k, T_k) = e_{jk}(\rho_k) + C_{vk} T_k$. En injectant cette expression dans la définition de l'énergie interne du mélange on obtient la définition de la température de mélange :

$$T = \frac{\rho e - \sum \alpha_k \rho_k e_{jk}(\rho_k)}{\alpha_k \rho_k C_{vk}}$$

qui est la température qui nous intéresse.

4.4 Résultats

Le modèle et la méthode sont appliquées au même test du tube à choc que précédemment, sur le même maillage et les résultats sont affichés au même instant. On peut noter que cette méthode fournit une qualité de résultats comparable à la précédente, à l'exception près que la température est maintenant parfaitement déterminée (voir figure 4).

Cette méthode constitue donc un candidat de choix pour la présente application. Toutefois, on peut noter que cette formulation n'est pas exempte d'imperfection. Ses deux défauts essentiels sont :

- Une diffusion numérique excessive de l'interface. Ceci peut être noté en comparant la courbe de diffusion de la densité à l'interface entre le modèle minimum et le présent modèle. La méthode numérique du modèle multiphasique est trop diffusive aux interfaces. Ceci sera remédié dans un futur proche.

- Un coût calcul important. Le nombre d'équations à résoudre est au minimum le double que pour le modèle minimum dans le cas de deux fluides (le triple dans le cas de trois fluides etc.). Ainsi l'opérateur hyperbolique a lui seul est au moins deux fois plus coûteux que pour une formulation monofluide. S'ajoute ensuite le coût calcul de l'opérateur de relaxation : ce dernier peut être plus coûteux que l'opérateur hyperbolique.

C'est pourquoi nous allons maintenant rechercher une formulation qui ne souffre pas de ces défauts tout en garantissant la même efficacité pour le calcul de la température. Bien sur, ceci sera réalisé au prix d'une perte de généralité : le nouveau modèle ne sera valide que pour les problèmes à interfaces.

5 Modèle multiphasique réduit

Ce modèle est en fait une réduction du modèle précédent dans le sens où il ne sera valide que pour des problèmes à interfaces, alors que le modèle précédent était valide pour des

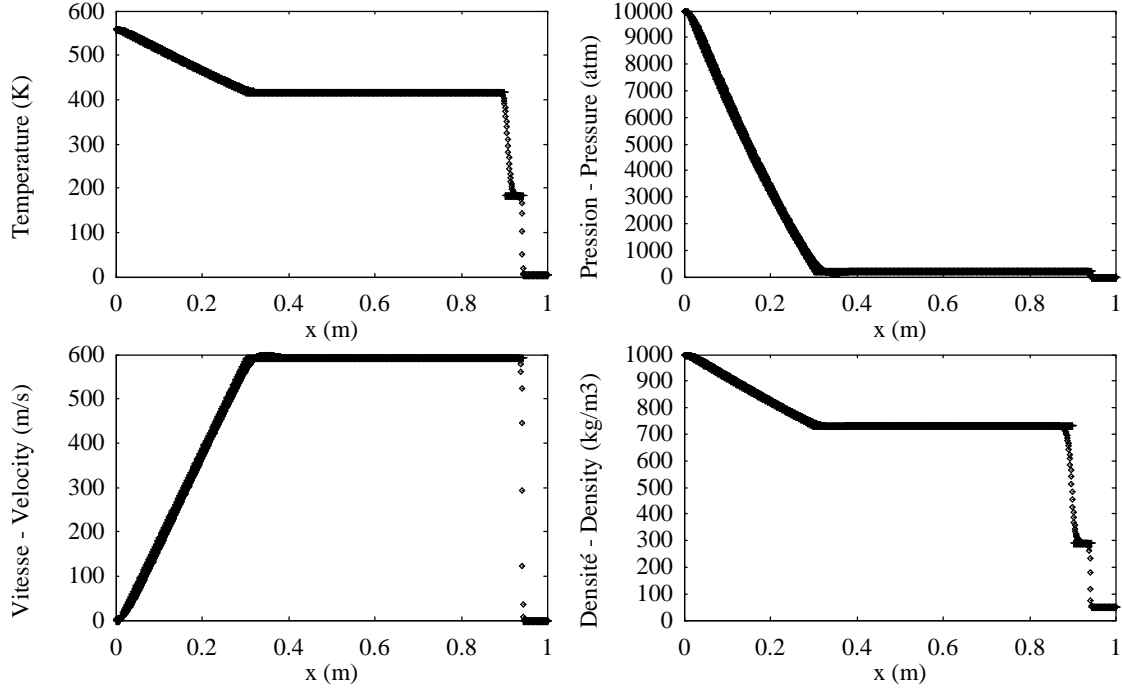


FIG. 4 – Tube à choc liquide/gaz. Modèle multiphasique complet. Solution exacte en traits épais. Solution numérique en symboles. Maillage à 1000 cellules.

mélanges au sens large. Ce nouveau modèle se rapproche de précédentes tentatives infructueuses de modèles homocinétiques comme décrit dans Cocchi [7].

L'expérience acquise dans la mise au point du modèle et de la méthode précédente, sol-dée par un succès à la fois pour le calcul des variables dynamiques et thermodynamiques (y compris T) nous incite à en reprendre certains ingrédients qui vont venir compléter le premier modèle étudié (le modèle minimal).

Les informations essentielles apportées par le modèle multiphasique sont en effet:

- la connaissance des densités de chacun des matériaux purs permettant une détermination correcte des fonctions $e_{jk}(\rho_k)$ qui interviennent dans le calcul de la température,
- la non dépendance spatio-temporelle des différentes constantes des équations d'état.

Ainsi, le nouveau modèle que nous proposons d'utiliser est obtenu par sommation des équations d'énergie et du mouvement de chaque phase. Il est composé de deux équations pour chaque phase k et de deux équations traduisant l'évolution du mouvement moyen et de l'énergie du mélange:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \vec{u} \nabla \alpha_k &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla (\alpha_k \rho_k \vec{u}) &= 0 \\
\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + P) &= 0 \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla (\vec{u} (\rho E + P)) &= 0
\end{aligned} \tag{12}$$

Les notations sont celles qui ont été définies précédemment.

Il est très clair que ce modèle est une réduction du modèle multiphasique complet précédent. Il est aussi facile de montrer qu'il est une extension du modèle minimum que nous avons examiné en premier.

En effet, l'équation de conservation de la masse du modèle minimum est obtenue par simple sommation des équations de conservation de la masse de chaque phase k . De plus, l'équation $\frac{\partial 1/(\gamma-1)}{\partial t} + u \frac{\partial 1/(\gamma-1)}{\partial x} = 0$ indispensable au modèle minimum est en réalité identique à

$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \vec{u} \nabla \alpha_k = 0$ du nouveau modèle. En effet, comme nous allons le voir dans les paragraphes suivants $1/(\gamma-1) = \sum \alpha_k / (\gamma_k - 1)$.

Une autre remarque importante s'impose. *L'utilisation de ce modèle lors de la résolution peut conduire à des résultats corrects ou complètement erronés.* C'était déjà le cas des modèles précédents, mais ici la séquence des opérations est très importante. Par exemple, si ce modèle est utilisé sous l'hypothèse d'égalité des températures entre phases, les conditions d'interface les plus élémentaires ne seront pas satisfaites, alors qu'utilisé comme isobare, les résultats sont tout à fait satisfaisants. Nous verrons aussi que lorsque le modèle est utilisé sous sa forme isotherme, il n'est alors absolument pas isobare, et inversement. Il ne s'agit donc nullement d'un modèle isobare - isotherme.

Faisons lui subir tout d'abord le test habituel : un écoulement uniforme en pression et en vitesse doit le rester durant son évolution temporelle.

La discrétisation des équations de masse et du mouvement conduit aux mêmes résultats que pour le modèle minimal. On reprend donc les développements à partir de la forme discrète de l'équation d'énergie :

$$\rho e_i^{n+1} = \rho e_i^n - \lambda u (\rho e_+^* - \rho e_-^*)$$

L'état " * " désigne l'état solution du problème de Riemann obtenu par un solveur adapté pour le système étudié. Nous reviendrons sur cette question par la suite.

Comme précédemment on utilise la définition de l'énergie interne du mélange $\rho e = \sum \alpha_k \rho_k e_k$. On remplace chaque produit $\rho_k e_k$ par leur expression en fonction de la pression en utilisant la loi d'état sous la forme Mie-Gruneisen. On obtient :

$$\rho e = \sum \alpha_k / \Gamma_k P_k - \sum \alpha_k / \Gamma_k P_{jk}(\rho_k) + \sum \alpha_k \rho_k e_{jk}(\rho_k)$$

Dans le cadre de l'équation d'état stiffened gaz, les fonctions $P_{jk}(\rho_k)$ et $e_{jk}(\rho_k)$ peuvent être combinées afin de faire disparaître la dépendance en ρ_k (voir la première forme de

la loi d'état stiffened gas de ce document). En remplaçant maintenant l'expression de ρe dans la forme discrète de l'équation d'énergie, on obtient une condition nécessaire pour que la pression reste uniforme au cours du temps. Cette condition est en fait le schéma de discrétisation de l'équation non conservative :

$$\alpha_{k_i}^{n+1} = \alpha_{k_i}^n - \lambda u (\alpha_{k+}^* - \alpha_{k-}^*)$$

Il s'agit une fois de plus du même schéma que pour le modèle multiphasique et le modèle minimal.

Lorsque les fonctions $P_{jk}(\rho_k)$ et $e_{jk}(\rho_k)$ sont réellement fonction de la densité de chaque fluide, on peut montrer qu'un terme supplémentaire doit être pris en compte dans l'équation d'évolution de la fraction volumique. Notre expérience acquise à l'aide de test numériques basés sur le modèle multiphasique en utilisant des lois d'état complexes a montré que l'importance de ces termes n'était pas fondamentale pour la résolution. La raison est que la densité des fluides ρ_k varie peu autour de l'interface. Ainsi les fonctions $P_{jk}(\rho_k)$ et $e_{jk}(\rho_k)$ sont localement des constantes, et la discrétisation proposée est adaptée.

5.1 Fermeture thermodynamique

Afin d'obtenir la pression de mélange à utiliser dans le modèle, on reprend la définition de l'énergie interne du mélange dans laquelle on suppose que toutes les pressions P_k sont égales. Il s'agit alors d'un modèle isobare. La pression est alors obtenue par :

$$P = \frac{\rho e + \sum \alpha_k / \Gamma_k P_{jk}(\rho_k) - \sum \alpha_k \rho_k e_{jk}(\rho_k)}{\sum \alpha_k / \Gamma_k} \quad (13)$$

Les températures de chaque fluide sont alors obtenues par l'utilisation des deux équations d'état des fluides purs :

$$T_k = (e_k - e_{jk}(\rho_k)) / C_{vk}$$

où l'énergie interne de chaque fluide est obtenue par la connaissance de la pression :

$$e_k = \frac{P - P_{jk}(\rho_k)}{\rho_k \Gamma_k} + e_{jk}(\rho_k)$$

La température de mélange est alors obtenue par la même formule que dans le cas multiphasique, que l'on peut simplifier ainsi :

$$T = \frac{\sum \alpha_k \rho_k C_{vk} T_k}{\sum \alpha_k \rho_k C_{vk}} \quad (14)$$

Une remarque importante s'impose. Plutôt que de supposer que les pressions des différents fluides sont égales nous aurions pu supposer que les températures des fluides étaient égales. Dans ce cas, la séquence de calcul qui permettrait le calcul de la pression serait :

- extraire la température de :

$$T = \frac{\rho e - \sum \alpha_k \rho_k e_{jk}(\rho_k)}{\sum \alpha_k \rho_k C_{vk}}$$

- déterminer les énergies internes des fluides :

$$e_k(\rho_k, T) = e_{jk}(\rho_k) + C_{vk} T$$

- déterminer les pressions de chaque fluide :

$$P_k(\rho_k, e_k) = P_{jk}(\rho_k) + \rho_k \Gamma_k(e_k - e_{jk}(\rho_k))$$

- en déduire la pression de mélange:

$$P = \frac{\sum \alpha_k P_k / \Gamma_k}{\sum \alpha_k / \Gamma_k}$$

Contrairement à la première séquence basée sur l'hypothèse d'égalité des pressions, cette deuxième séquence conduit à un *non respect des conditions d'interface*. On peut s'en assurer en examinant le schéma de Godunov sur un pas de temps dans le cas d'un écoulement uniforme en vitesse et en pression. On peut aussi comprendre que cette procédure est vouée à l'échec car une discontinuité de contact est bien une zone de pression uniforme, tandis que la température est discontinue.

Contrairement au modèle multiphasique, ce modèle ne contient que 3 ondes distinctes : $u + c$, $u - c$ et u . Il est donc aussi inconditionnellement hyperbolique, et les relations des chocs sont largement plus simples puisque les termes non conservatifs sont absents.

La vitesse du son d'équilibre est obtenue aisément. En notant :

$$\begin{aligned}\beta &= \sum \frac{\alpha_k}{\Gamma_k} \\ \eta &= \sum \frac{\alpha_k P_{jk}(\rho_k)}{\Gamma_k} \\ \theta &= \sum \alpha_k \rho_k e_{jk}(\rho_k)\end{aligned}$$

on obtient :

$$c^2 = \frac{\rho e + P - \sum \rho_k \left(\left(\frac{\partial \eta}{\partial \rho_k} \right)_{\alpha_k} + \left(\frac{\partial \theta}{\partial \rho_k} \right)_{\alpha_k} \right)}{\rho \beta}$$

5.2 Solveur de Riemann

Le modèle étant peu différent des équations d'Euler, les solveurs de Riemann adaptés aux équations d'état de gaz réels seront facilement adaptables pour ce modèle. On peut citer les solveurs de type HLL, HLLC [22], Dubroca [10], Gallice [11], les solveurs linéarisés (en variables primitives ou en variables caractéristiques, Toro [22]) etc.

Dans le cas particulier où la loi d'état de chaque fluide est de type stiffened gas, on peut aussi utiliser un solveur exact. Les paramètres de mélange de la loi d'état stiffened gas s'écrivent :

$$\gamma = 1 + 1/\beta$$

$$P_\infty = \frac{\gamma - 1}{\gamma} (\theta - \eta - \sum \alpha_k \rho_k c_{0k})$$

et un solveur de Riemann classique développé pour les équations d'Euler avec l'équation d'état stiffened gas s'applique. Ceci permet de conserver le même solveur de Riemann pour les comparaisons entre modèles.

5.3 Résultats

Le modèle et la méthode sont appliquées au même test du tube à choc que précédemment, sur le même maillage et les résultats sont affichés au même instant. Le nouveau modèle fournit une solution en parfait accord avec la solution exacte et la diffusion numérique de l'interface n'est pas plus importante qu'avec le modèle minimum (figure 5). On peut même noter un léger progrès. En fait la solution n'est pas plus diffusée que pour une simulation faisant intervenir les équations d'Euler portant sur un fluide pur.

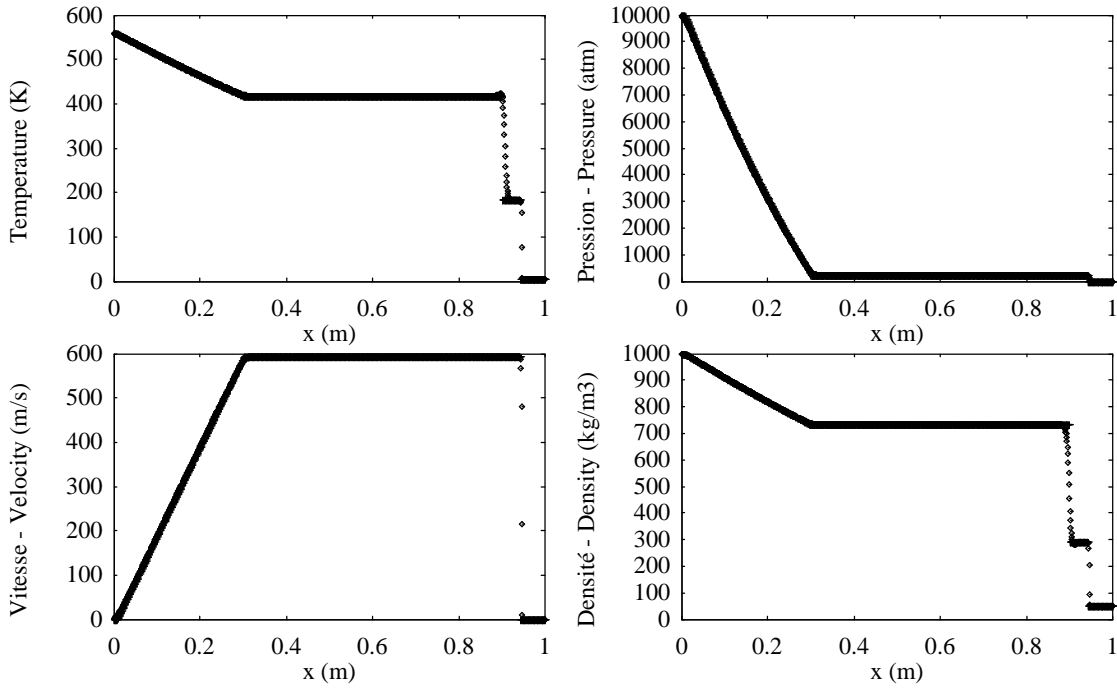


FIG. 5 – Tube à choc liquide/gaz. Modèle multiphasique réduit. Solution exacte en traits épais. Solution numérique en symboles. Maillage à 1000 cellules.

On peut maintenant examiner la qualité de la solution lorsque le maillage est plus grossier. On reprend le même cas test mais en utilisant maintenant seulement 200 cellules de calcul. Les résultats sont représentés sur la figure 6.

Cette méthode assure une précision tout à fait correcte et est à peine plus coûteuse que la simple résolution des équations d'Euler pour un fluide pur. Il s'agit donc d'un excellent candidat pour la présente application.

Nous allons néanmoins examiner une autre méthode qui a été proposée récemment car elle semble posséder des aptitudes à converger vers la solution de façon très efficace.

6 Méthode à deux flux

Cette dernière méthode se distingue des précédentes. On revient à une formulation basée uniquement sur les équations d'Euler complétée par une fonction indicatrice permettant la localisation de l'interface. Cette méthode ne considère plus le mélange numérique qui se crée. Elle se contente de déterminer des flux numériques pour les mailles proches de l'interface qui vont ignorer le mélange artificiel tout en satisfaisant les conditions d'interface. Cette méthode est décrite dans Abgrall et Karni [2].

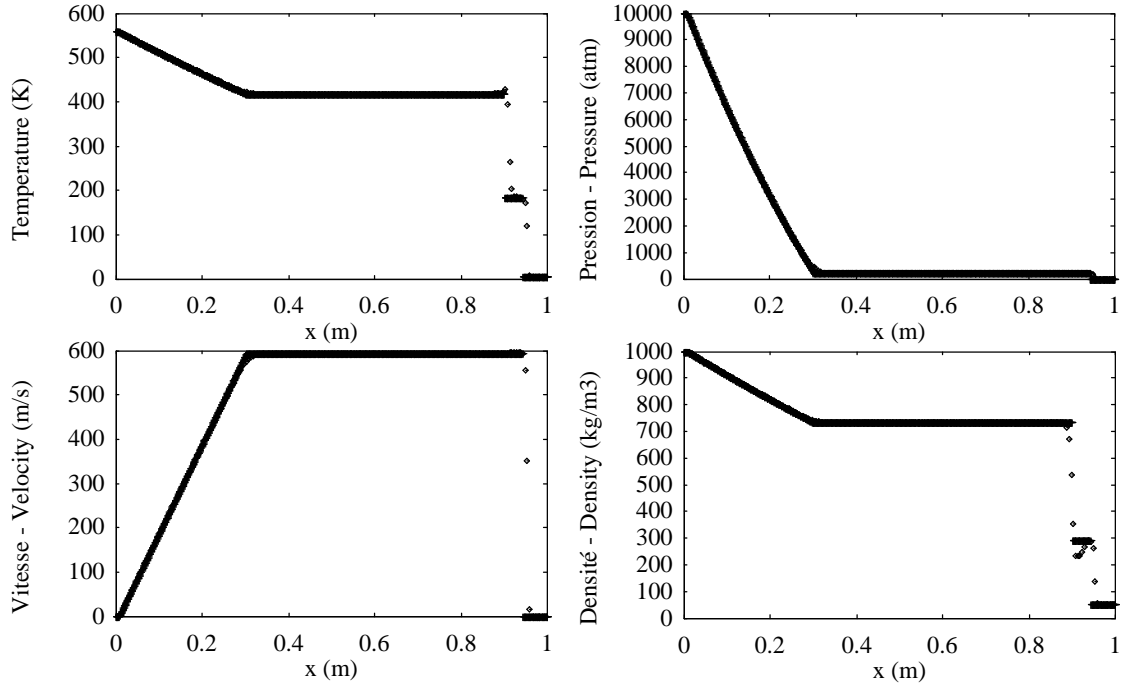


FIG. 6 – Tube à choc liquide/gaz. Modèle multiphasique réduit. Solution exacte en traits épais. Solution numérique en symboles. Maillage à 200 cellules.

Le modèle est simplement composé des équations d'Euler complétées par un scalaire passif qui permet la détermination de la position de l'interface.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{u}) &= 0 \\
 \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + P) &= 0 \\
 \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla(\vec{u}(\rho E + P)) &= 0 \\
 \frac{\partial \rho f}{\partial t} + \nabla(\rho f \vec{u}) &= 0
 \end{aligned} \tag{15}$$

La fonction f vaut initialement 1 dans un des deux fluides et -1 dans l'autre. L'interface est représentée par le niveau 0 de cette fonction. Cette fonction est appelée Level Set dans la littérature anglo-saxonne.

Comme précédemment on note U le vecteur des variables conservatives : $U = (\rho, \rho u, \rho E, \rho f)^T$ et W le vecteur des variables primitives. Notons aussi EOS_k l'équation d'état du fluide k accompagnée de ses propres paramètres.

La méthode suit une séquence très précise :

- 1) On connaît pour tout point i à l'instant t_n les variables primitives W_i^n .

2) On calcule le vecteur des variables conservatives U_i^n en utilisant EOS_i^n (l'équation d'état du fluide approprié à l'instant t_n et au point considéré).

3) Si le produit $f_i^n \cdot f_{i+1}^n < 0$ alors l'interface se situe entre les centres des mailles i et $i+1$.

4) Dans ce cas seulement on calcule deux flux numériques sur le bord de maille $i+1/2$:

$$F_{i+1/2,-}^* = RP(W_i^n, W_{i+1}^n, EOS_i^n, EOS_i^n)$$

En effet, le flux numérique qui va être utilisé dans le schéma de Godunov pour l'évolution en temps de la maille i est obtenu à l'aide des variables primitives de part et d'autre du bord de maille, et donc de l'interface, mais en utilisant de chaque côté l'équation d'état du fluide présent dans la maille i .

De façon symétrique, on calcule

$$F_{i+1/2,+}^* = RP(W_i^n, W_{i+1}^n, EOS_{i+1}^n, EOS_{i+1}^n)$$

qui sera utilisé pour l'évolution en temps des variables de la maille $i+1$. On utilise cette fois l'équation d'état du fluide $i+1$ présent dans cette maille à l'instant t_n .

Remarquons que $F_{i+1/2,-}^* \neq F_{i+1/2,+}^*$.

5) Le schéma de Godunov permet alors l'évolution en temps de la solution :

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \lambda(F_{i+1/2}^* - F_{i-1/2}^*)$$

6) Afin d'assurer l'uniformité en pression de la solution dans le cas d'une discontinuité de contact on calcule le vecteur des variables primitives

W_i^{n+1} à partir de U_i^{n+1} mais en utilisant l'équation d'état de l'instant t_n , EOS_i^n .

7) On reconstruit alors le vecteur des variables conservatives en utilisant maintenant l'équation d'état du fluide à l'instant t_{n+1} : $U_i^{n+1} = U(W_i^{n+1}, EOS_i^{n+1})$. EOS_i^{n+1} est obtenu en fonction du produit $f_i^n \cdot f_{i+1}^n$ comme en (3).

Cette méthode n'est malheureusement pas conservative, mais est dotée d'une robustesse et d'une capacité de convergence impressionnante dans le cas 1D au moins. Elle a été mise en œuvre avec succès dans le cas 2D (Karni et Abgrall [16]). Les erreurs de conservation dans le cas 1D ont été évaluées de faible importance.

Sur le même test que précédemment, les résultats sont représentés sur la figure 7.

Il apparaît clairement que la température est très erronée. Cette méthode utilisée sous sa formulation standard conduit donc à de grandes erreurs. La raison est aisément compréhensible. Les variables densité et énergie interne subissent une diffusion artificielle au niveau de l'interface. Par contre, les paramètres de l'équation d'état sont exactement calculés, puisque l'interface est exactement repérée par la fonction Level Set. Le calcul de la température est donc effectué avec d'une part des variables artificielles comme la densité et l'énergie interne, et des variables exactes comme C_v et γ . La combinaison de variables exactes et artificielles conduit à l'incompatibilité qui apparaît sur la température.

Cette méthode peut toutefois être modifiée et améliorée en utilisant les enseignements apportés par le modèle multiphasique réduit. En effet, la méthode à deux flux permet une évaluation correcte de la pression, ce qui permettrait une évaluation des énergies internes des fluides par

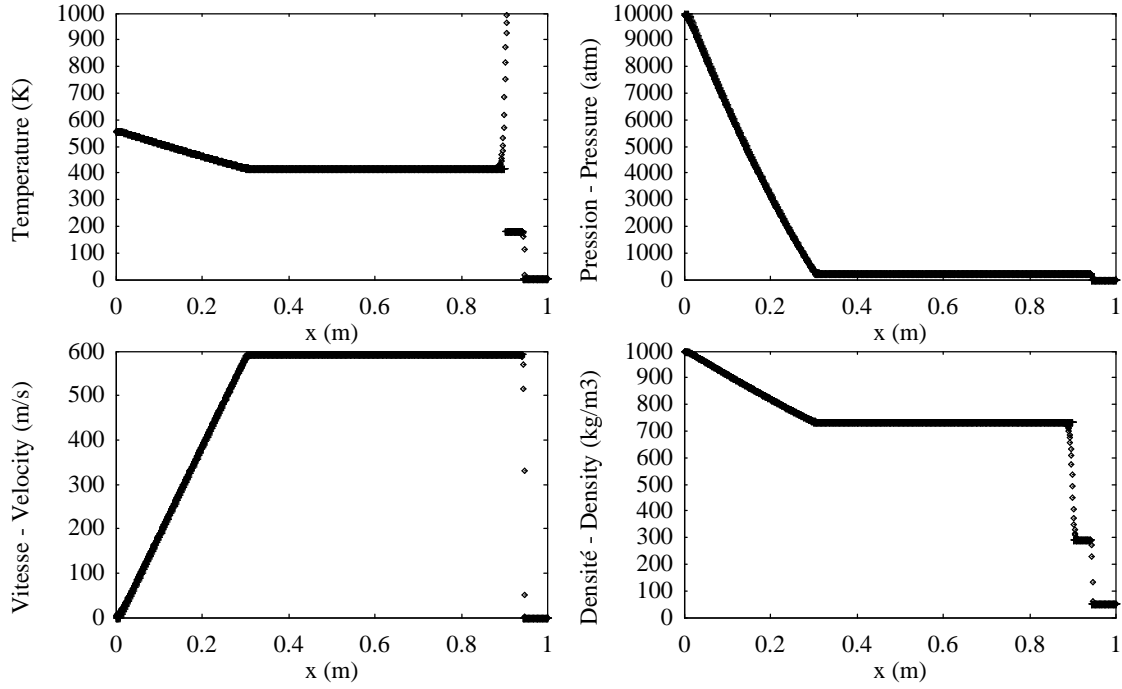


FIG. 7 – Tube à choc liquide/gaz. Méthode à deux flux. Solution exacte en traits épais. Solution numérique en symboles. Maillage à 1000 cellules.

$$e_k = \frac{P - P_{jk}(\rho_k)}{\rho_k \Gamma_k} + e_{jk}(\rho_k)$$

et par voie de conséquence des températures par

$$T_k = (e_k - e_{jk}(\rho_k))/C_{vk}$$

à condition que les densités des différents fluides soient connues. Leur détermination peut être réalisée comme précédemment en complétant le système du modèle à deux flux par les deux premières équations du modèle multiphasique réduit. Le système complet devient alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \vec{u} \nabla \alpha_k &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla (\alpha_k \rho_k \vec{u}) &= 0 \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla (\rho \vec{u}) &= 0 \\ \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + P) &= 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla (\vec{u} (\rho E + P)) &= 0 \\ \frac{\partial \rho f}{\partial t} + \nabla (\rho f \vec{u}) &= 0 \end{aligned} \tag{16}$$

La première des équations rajoutées est résolue par le schéma non conservatif habituel, tandis que les équations portant sur les densités partielles sont résolues par le schéma conservatif. Observons maintenant le comportement de la solution sur le test du tube à choc avec un maillage à 1000 cellules. Les résultats sont représentés sur la figure 8. La précision sur le calcul de la température est maintenant pleinement satisfaisante.

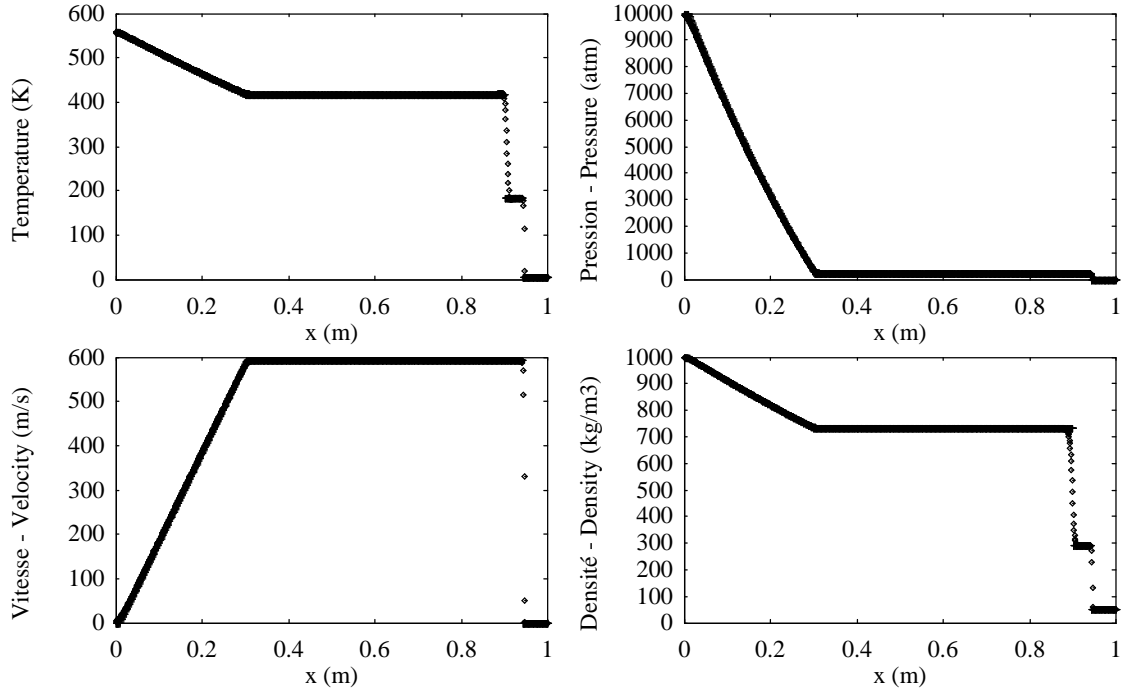


FIG. 8 – Tube à choc liquide/gaz. Méthode à deux flux modifiée. Solution exacte en traits épais. Solution numérique en symboles. Maillage à 1000 cellules.

En utilisant un maillage plus grossier, le même type d'accord est conservé (voir figure 9).

Cette méthode présente désormais une précision comparable au modèle multiphasique réduit. Néanmoins son application pour le présent problème pose certaines difficultés et questions :

- La stabilité des résultats demande des pas de temps environ 40 pour-cent plus faibles qu'avec le modèle multiphasique réduit.

- La position du choc est légèrement sur-évaluée par rapport à la solution exacte. Ceci est une conséquence de la perte de conservation.

- Le caractère conservatif est perdu. On peut s'attendre à une perte plus importante en multidimensionnel en raison des positions singulières que peut prendre l'interface sur le maillage. L'interface peut croiser deux fois un des axes du maillage dans la même cellule, et l'erreur de conservation peut être aggravée.

- L'extension de la méthode au cas de plusieurs fluides (au nombre supérieur à deux) peut poser des problèmes d'interpénétration des fonctions Level-Set. Ce problème doit être considéré avec une attention particulière et viendra pénaliser l'efficacité globale de la méthode.

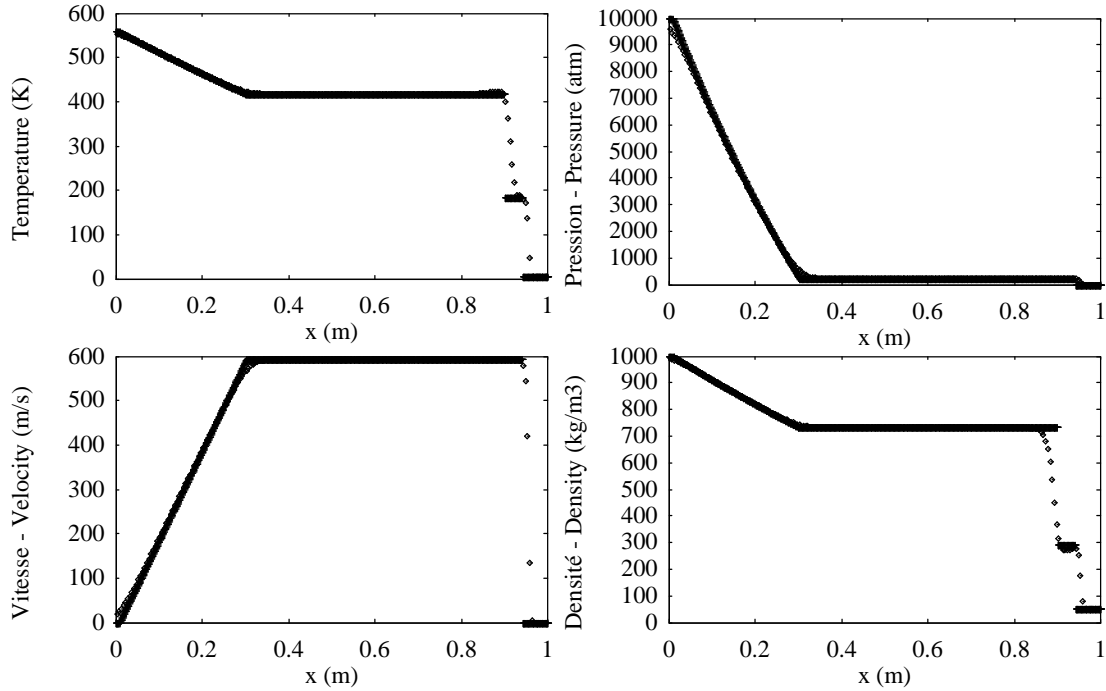


FIG. 9 – Tube à choc liquide/gaz. Méthode à deux flux modifiée. Solution exacte en traits épais. Solution numérique en symboles. Maillage à 200 cellules.

Pour résumer, cette méthode constitue un bon candidat pour la présente application, mais nécessitera un investissement supérieur autant au niveau des ressources informatiques qu’humaines que le modèle multiphasique réduit.

7 Traitement de la diffusion de la chaleur

Les différentes méthodes que nous venons d’évaluer pour le calcul de la température sont toutes potentiellement utilisables pour l’application qui nous intéresse. Le premier modèle souffre encore de quelques défauts de mise au point et nous préférons l’abandonner. La deuxième méthode, basée sur une description multiphasique de l’écoulement est un excellent candidat. Toutefois, avec la méthode numérique qui est utilisée, les interfaces sont très diffusées et le traitement des termes non conservatifs aux chocs souffre de quelques imperfections. Nous examinons actuellement une nouvelle méthode qui répondra à ces questions [4].

Il est important aussi d’examiner l’objectif visé. Si le seul objectif est de traiter le problème à interface sous fort rayonnement qui est décrit en introduction, ce type de modèle et de méthode est peut être trop riche et trop complexe. Si une autre physique est à envisager : chocs dans les mélanges, effets inertiels aux micro-échelles, détonations, cavitation, alors ce modèle doit faire l’objet d’une attention particulière.

Dans le cadre de ce document, nous considérons que seule l’application présentée en introduction est visée. Dans ce cas, les troisième et quatrième modèles, basés sur le modèle multiphasique réduit et la méthode à deux flux sont plus compétitifs. Ils sont en effet plus simples à résoudre, plus rapidement et plus précisément. Parmi ces deux méthodes, la plus compétitive en terme d’investissement informatique et humain est la méthode basée sur le modèle multiphasique réduit. C’est celle que nous retenons pour la suite de l’étude et pour

laquelle nous envisageons maintenant le traitement des termes de diffusion de la chaleur.

Le système est maintenant complété par un terme de diffusion de chaleur dans l'équation d'énergie :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \vec{u} \nabla \alpha_k &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla (\alpha_k \rho_k \vec{u}) &= 0 \\
\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + P) &= 0 \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla (\vec{u} (\rho E + P)) &= \text{div}(\lambda \nabla T)
\end{aligned} \tag{17}$$

Le terme $\text{div}(\lambda \nabla T)$ est obtenu par sommation des termes diffusifs des équations d'énergie de chaque phase:

$$\text{div}(\lambda \nabla T) = \sum \text{div}(\alpha_k \lambda_k \nabla T)$$

La discrétisation de ce terme ne pose alors aucune difficulté tant que la vitesse de diffusion est inférieure à la vitesse de convection. On considère un maillage 1D à pas constant Δx . On note $q_k = -\alpha_k \lambda_k \frac{\partial T}{\partial x}$ le flux de chaleur et $F_{k,th} = (0, 0, \vec{0}, \sum q_k)$ le flux thermique de la formulation du système multiphasique réduit

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \text{div}(F(W) - F_{th}(W)) = 0$$

L'approximation numérique du flux thermique est obtenue par une formule très classique pour les méthodes en volumes finis:

$$F_{k,th,i+1/2}^* = - \sum \alpha_{k,i+1/2} \lambda_{k,i+1/2} \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x} \tag{18}$$

7.1 Résultats

On reprend le précédent test du tube à choc en tenant maintenant compte des conductivités thermiques des matériaux. La conductivité thermique du matériau de gauche a été prise égale à $2 \times 10^5 W/m/K$ et celle du matériau de droite à $5 \times 10^4 W/m/K$. Ces valeurs extrêmes de conductivité sont de l'ordre de grandeur de celles utilisées en physique des plasmas pour modéliser des transferts thermiques complexes. Ici, ces valeurs vont permettre de mettre en évidence les différences entre les résultats exempts d'effets diffusifs de ceux tenant compte de la conductivité. Sur la figure 10 on a représenté les champs des variables habituelles. On peut noter la dilatation du fluide de droite sous l'effet de l'échauffement diffusif et l'apparition d'une mise en vitesse légèrement différente. Sur la figure 11 on a effectué un zoom de la température autour de l'interface. La solution qui tient compte des effets diffusifs est plus déportée à droite.

Afin de s'assurer du traitement correct des effets diffusifs, nous allons considérer un autre cas test montrant l'établissement du régime diffusif. En effet, l'obtention d'une solution de référence n'est pas aisée pour ce problème où la dilatation du fluide est couplée à l'apparition d'ondes. L'ensemble des couplages ne permet pas l'analyse d'une solution quasi-stationnaire ni auto-semblable. Nous pourrions donc seulement vérifier que l'état stationnaire où les gradients de température sont nuls est bien obtenu. Les données de ce cas test sont rassemblées dans la table suivante:

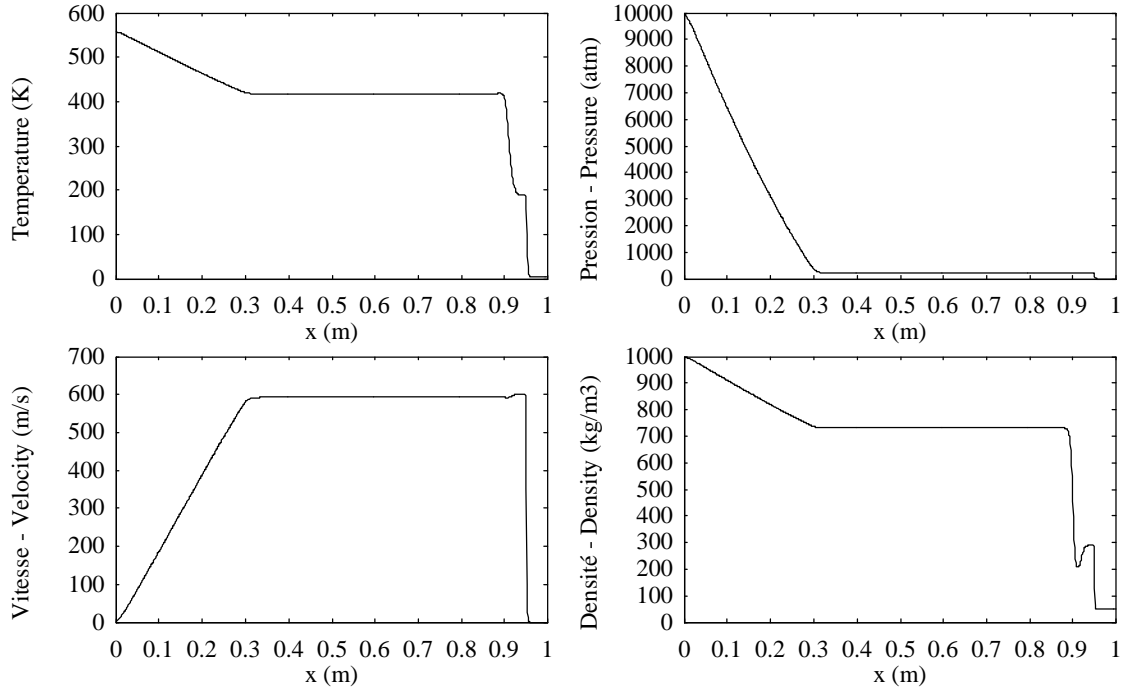


FIG. 10 – Tube à choc liquide/gaz. Modèle multiphasique réduit avec prise en compte des conductivités thermiques. Maillage à 1000 cellules.

	<i>Fluide1</i>	<i>Fluide2</i>
$\rho(\text{kg/m}^3)$	2	1
$P(\text{Pa})$	10^5	10^5
$u(\text{m/s})$	0	0
γ	1.4	1.4
$P_\infty(\text{Pa})$	0	0
$C_v(\text{J/kg/K})$	250	1000
$\rho_0(\text{kg/m}^3)$	2	1
$P_0(\text{Pa})$	10^5	10^5
$\lambda(\text{W/m/K})$	10^4	5×10^3

Ces données permettent d'obtenir un état stationnaire assez rapidement comme on peut le constater sur le figure 12. La condition initiale est représentée en traits pleins. Elle correspond à un champ uniforme de pression à vitesse nulle. Une discontinuité de température et de densité est présente au centre du domaine. A l'instant $t = 0.14\text{s}$ on représente les valeurs des différentes variables (traits et symboles) montrant l'évolution vers le régime d'équilibre qui est représenté à l'instant final $t = 0.28\text{s}$. A cet instant, la température, pression et vitesse sont uniformes. Le champ de densité montre le déplacement de l'interface (la solution à l'instant final est représentée en traits pleins): le fluide chaud est maintenant à une température d'équilibre et s'est contracté, alors que le fluide initialement froid s'est dilaté.

On considère finalement un problème multidimensionnel, généralisation de la situation représentée sur la Figure 1. Pour des raisons de simplicité nous allons faire deux approximations. D'abord, le problème du transfert radiatif responsable de l'échauffement et de l'expansion des matériaux ne sera pas considéré. On suppose en effet que toute l'énergie rayonnée est initialement absorbée sur une durée infiniment courte par le matériau A et que sa pression et sa température augmentent sans variation de volume. Ainsi, à l'instant initial

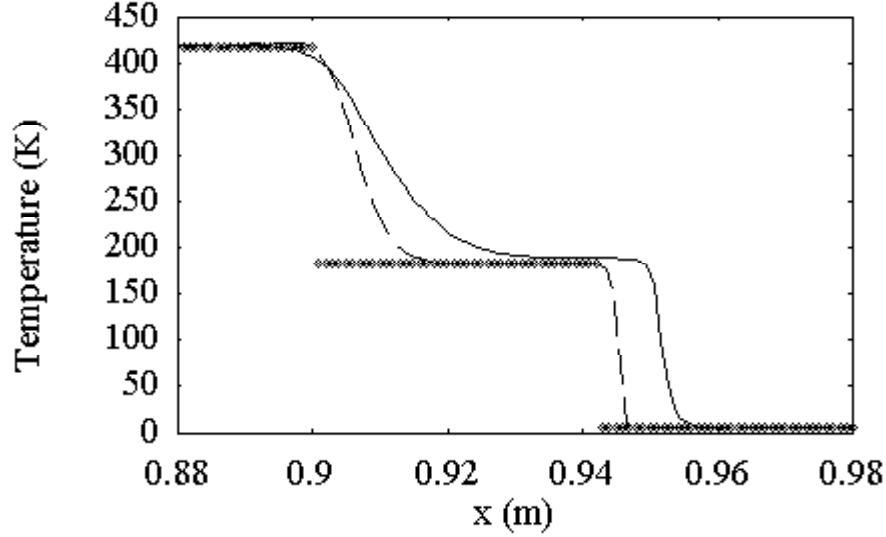


FIG. 11 – Zoom de la température sur le problème du tube à choc. Solution exacte du problème sans diffusion en symboles. Solution numérique sans diffusion et avec diffusion en lignes brisées. La solution qui tient compte de la diffusion est la plus déportée à droite.

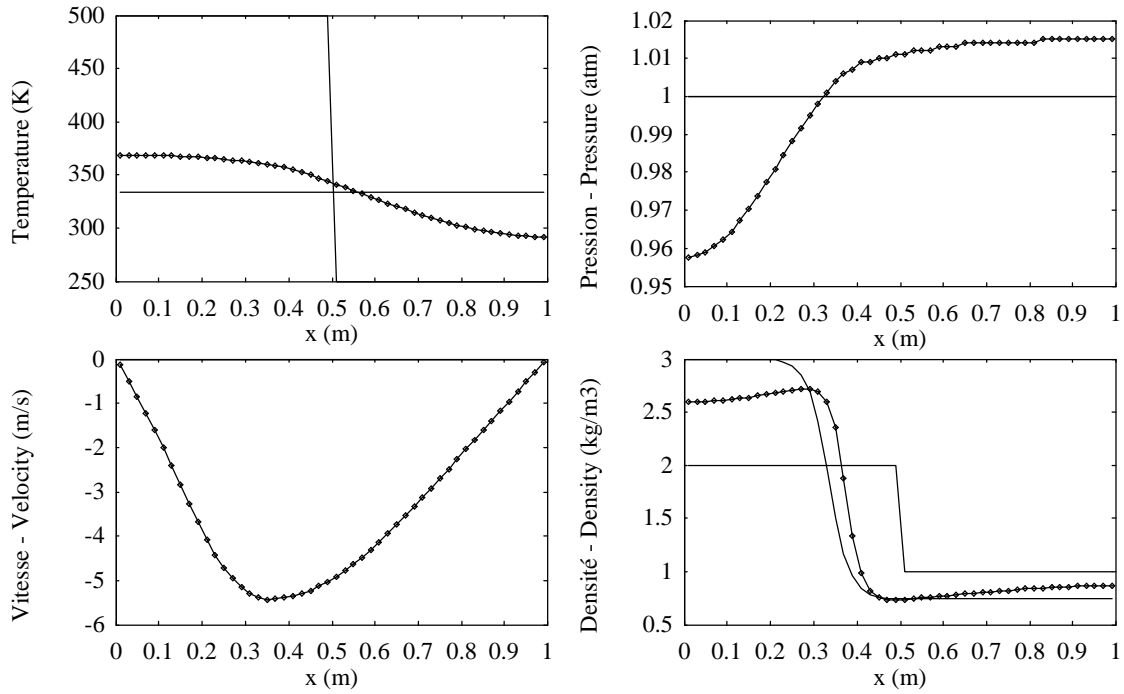


FIG. 12 – Problème test pour la diffusion thermique

de la simulation, le matériau A est un matériau sous haute pression, entouré d'autres fluides à pression atmosphérique. Les fluides environnant sont peu denses par rapport au fluide A. La configuration est représentée sur la Figure 13 en haut à gauche. La deuxième approximation consiste à considérer le problème en symétrie cylindrique plutôt que sphérique. En d'autres termes, le calcul sera réalisé en 2D alors qu'il devrait l'être en 3D. Malgré cette

approximation on pourra vérifier la reproduction de résultats encourageant par l'outil de simulation.

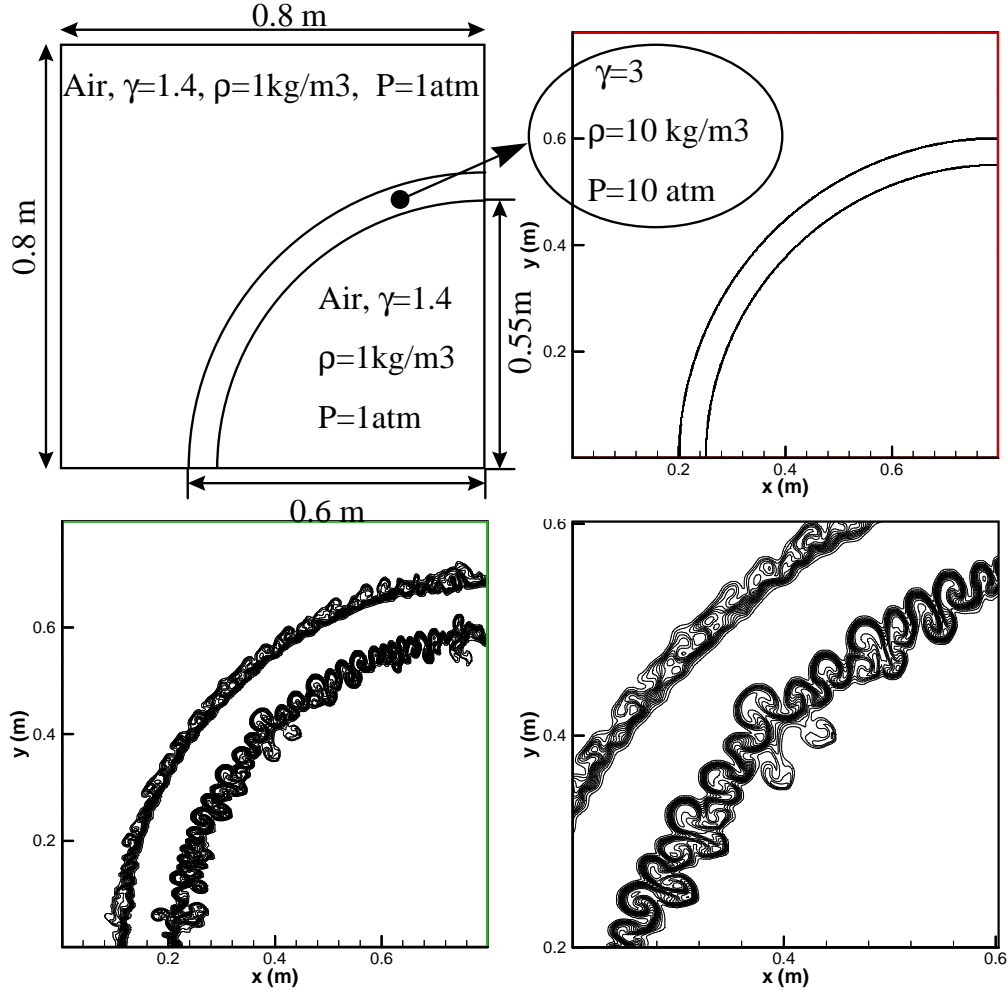


FIG. 13 – Schéma de la configuration bidimensionnelle test et champ de fraction volumique du fluide lourd à l'instant 2.63ms obtenu par le modèle multiphasique réduit, résolu par le schéma de Godunov modifié. En bas à droite on a effectué un zoom du champ de fraction volumique.

Sur la Figure 13 en haut à droite on a représenté les conditions initiales du problème. Le maillage est parfaitement cartésien et est constitué de 500×500 cellules. En raison de la structure cartésienne du maillage, les arcs de cercle vont contenir des imperfections dans leur description géométrique. Ces imperfections sont suffisantes pour amorcer le phénomène d'instabilité hydrodynamique qui est observé sur les graphes suivants (Figure 13 en bas). La résolution numérique du modèle multiphasique réduit en 2D est réalisée en étendant l'algorithme 1D qui a été présenté précédemment dans un premier temps à l'ordre 2 puis en multidimensions en prenant les précautions détaillées dans Saurel et Abgrall [19]. Le champ de fraction volumique du fluide lourd est représenté sur ces figures à l'instant 2.63ms . Le champ de fraction volumique est représentatif de la position de l'interface. On observe clairement les instabilités de type Richtmyer-Meshkov qui se développent intensément, produisant un mélange du fluide lourd et du léger. Ces simulations sont obtenues en utilisant un nombre

de Courant de 0.8.

8 Conclusion

Une comparaison de plusieurs méthodes euleriennes pour les écoulements compressibles avec interfaces a été effectuée. Un nouveau modèle a été proposé et s'est avéré à la fois simple, précis et efficace pour le calcul des variables thermodynamiques et cinématiques de l'écoulement. Il repose sur une formulation multiphasique réduite et s'applique en tout point, en particulier dans les zones où un mélange artificiel est produit. Sa résolution est réalisée par un schéma de type Godunov d'ordre 2 avec le même type de solveur de Riemann que pour les équations d'Euler. La méthode a été validée sur différents tests possédant des solutions exactes.

Remerciements Cette étude a été réalisée durant les six semaines de l'école d'été CEM-RACS 2000 à Marseille sur un sujet proposé par le CEA/CESTA Bordeaux. Nous tenons à remercier MM. Bruno Dubroca et Duffa pour leur confiance et leur soutien. Nous avons aussi bénéficié d'un soutien important dans la mise en œuvre informatique de la part de Thomas Barberon, Sandra Rouy de l'ISITV, Olivier LeMetayer et Eric Daniel de l'IUSTI et Raphaël Loubère du CEA/CESTA. Nous tenons à les assurer de notre reconnaissance.

Références

- [1] Abgrall, R. (1996) How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations: A quasi conservative approach. *Journal of Computational Physics*, **125**, pp 150-160
- [2] Abgrall, R. and Karni, S. (2000) Compressible multifluid. *Journal of Computational Physics*, en révision
- [3] Abgrall, R., Nkonga, B. and Saurel, R. (2000) Efficient numerical approximation of multi-material flow for unstructured meshes. Soumis
- [4] Abgrall, R. and Saurel, R. (2000) A numerical multiphase model. En préparation
- [5] Benson, D.J. (1992) Computational methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **99**, pp 235-394
- [6] Clavin, P. and Garcia, P. (1983) The influence of the temperature dependence of diffusivities on the dynamics of flame fronts. *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée*, **2**, pp 245-263
- [7] Cocchi, J.P. (1997) Modélisation de l'écoulement autour d'un projectile hypercinétique dans l'eau. Thèse de Doctorat. IUSTI, Université de Provence
- [8] Drew, DA and Passman, SL(1998) Theory of multicomponent fluids. Springer New York. Applied Mathematical Sciences **135**
- [9] Coutant, J., Decroisette, M., Juraszek, D., Meyer, B., Moreau, E. and Sitt, B. (1993) La fusion inertielle thermonucléaire par laser. Collection du CEA, Eyrolles, Paris
- [10] Dubroca, B. (1999) Positively conservative schemes for Gas Dynamics. C.R. Acad. Sci. Paris, 329, série I, p 827-832
- [11] Gallice, G. (2000) Schémas de type Godunov entropiques et positifs pour la dynamique des gaz et magnétohydrodynamique lagrangiennes. soumis
- [12] Gavriluk, S. and Saurel, R. (2000) A compressible multiphase flow model with translation and vibration. En préparation
- [13] Godunov S.K., Zabrodine, A., Ivanov, M., Kraiko, A. and Prokopov, G. (1979) Résolution numérique des problèmes multidimensionnels de la dynamique des gaz. Editions Mir, Moscou
- [14] Harten, A., Lax, P.D. and van Leer, B. (1983) On upstream differencing and Godunov type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Review*, **25**(1), pp 33-61
- [15] Kapila, A, Son, S, Bdzil, J, Menikoff, R and Stewart, D (1997) Two-phase modeling of DDT: structure of the velocity-relaxation zone. *Physics of Fluids* **9** : 12, pp 3885-3897
- [16] Karni, S. and Abgrall, R. (2000) Ghost fluid for the poor : A single fluid algorithm for multifluid. *Oberwolfach*
- [17] Masse, L., Hallo, L. and Talbot, C. (2000) Direct drive ablation front stability: numerical predictions against flame front model. in *Inertial Fusion Sciences and Applications 99*
- [18] Saurel R. and Abgrall R (1999) A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows *Journal of Computational Physics*, **150**, pp 425-467
- [19] Saurel R. and Abgrall R (1999) A simple method for compressible multifluid flows. *SIAM Journal of Scientific Computing*, **21** : 3, pp 1115-1145
- [20] Saurel R. and LeMetayer, O. (2000) A multiphase model for compressible flows with interfaces, shocks, detonation waves and cavitation *Journal of Fluid Mechanics*, in press
- [21] Strang, (1968) On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal Numerical Analysis*, Vol 5, No 3, pp 506-517
- [22] Toro, E.F. (1997) Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics. *Springer Verlag*, Berlin.
- [23] Shyue, K.M. (1998) An efficient shock-capturing algorithm for compressible multicomponent problems. *Journal of Computational Physics*, **142**, 208

Table des matières

1	Introduction	3
2	Thermodynamique et lois d'état	4
3	Modèle minimum	6
4	Modèle multiphasique	10
4.1	Relations de fermeture	12
4.2	Méthode numérique	14
4.3	Retour vers les variables monofluide	18
4.4	Résultats	19
5	Modèle multiphasique réduit	19
5.1	Fermeture thermodynamique	22
5.2	Solveur de Riemann	23
5.3	Résultats	24
6	Méthode à deux flux	24
7	Traitement de la diffusion de la chaleur	29
7.1	Résultats	30
8	Conclusion	35



Unité de recherche INRIA Sophia Antipolis
2004, route des Lucioles - B.P. 93 - 06902 Sophia Antipolis Cedex (France)

Unité de recherche INRIA Lorraine : Technopôle de Nancy-Brabois - Campus scientifique
615, rue du Jardin Botanique - B.P. 101 - 54602 Villers lès Nancy Cedex (France)

Unité de recherche INRIA Rennes : IRISA, Campus universitaire de Beaulieu - 35042 Rennes Cedex (France)

Unité de recherche INRIA Rhône-Alpes : 655, avenue de l'Europe - 38330 Montbonnot St Martin (France)

Unité de recherche INRIA Rocquencourt : Domaine de Voluceau - Rocquencourt - B.P. 105 - 78153 Le Chesnay Cedex (France)

Éditeur
INRIA - Domaine de Voluceau - Rocquencourt, B.P. 105 - 78153 Le Chesnay Cedex (France)
<http://www.inria.fr>
ISSN 0249-6399